

BESTIMMUNG DES KRITISCHEN EXPONENTEN η
DER KORRELATIONSFUNKTION SOWIE
DER EXPONENTEN ν UND γ VON NICKEL
AUS EINEM NEUTRONENSTREUEXPERIMENT

Rainer Anders

1982



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41549008_0003

BESTIMMUNG DES KRITISCHEN EXPONENTEN η
DER KORRELATIONSFUNKTION SOWIE
DER EXPONENTEN ν UND γ VON NICKEL
AUS EINEM NEUTRONENSTREUEXPERIMENT

DISSERTATION
DER FAKULTÄT FÜR PHYSIK DER
LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT
MÜNCHEN

VORGELEGT VON
RAINER ANDERS AUS BAMBERG
MÜNCHEN, DEN 7. DEZ. 1981



1. Gutachter: Prof. Dr. K. Stierstadt

2. Gutachter: Prof. Dr. H. Wagner

Tag der mündlichen Prüfung: 28. 1. 1982

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einführung und Zielsetzung	1
2. Theoretische Grundlagen zu Phasenumwandlungen und Neutronenstreuung im Hinblick auf eine experimentelle Bestimmung des kritischen Exponenten η	3
2.1 Phasenumwandlung und kritische Fluktuationen	3
2.2 Neutronenstreuung an kritischen Fluktuationen	9
2.2.1 Streuquerschnitt in 1.Born'scher Näherung	10
2.3 Fouriertransformierte Korrelationsfunktion $\hat{G}(\vec{q})$ und Skalenfunktion $\hat{D}(y)$	18
2.3.1 Gültigkeitsbereiche der Approximanden für $\hat{D}(y)$ und kritische Bewertung der bisher üblichen η -Bestimmung	23
2.3.2 Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ für 3d-Systeme	26
2.4 Bestimmung des Exponenten η aus dem Maximum $y_{\max}$ der Korrelationsfunktion	32
3. Durchführung der Experimente	40
3.1 Neutronenstreudiffraktometer D11	41
3.1.1 Radiale Zusammenfassung der Detektorelemente bei isotroper Streufigur	43
3.1.2 Inelastische Integration am Zweiachsen-Diffraktometer	45
3.1.3 Bestimmung des Untergrundes der Streuung	53
3.2 Streukammer und Temperaturregelung des Ofens	55
3.3 Nickelprobe	57
4. Experimentelle Ergebnisse und deren Diskussion	59
4.1 "Scaling" - Verhalten der kritischen Streuung	59
4.2 Experimentelle Bestimmung der kritischen Exponenten γ und ν	63

II

4.3	Bestimmung des Exponenten η aus der Temperatur $T_{\max}(q)$ des Maximums der kritischen Streuung	65
4.4	Vergleich der gemessenen Zahlenwerte von η , γ und ν mit Ergebnissen aus theoretischen Arbeiten und anderen Experimenten	68
5.	Zusammenfassung	71
6.	Literaturverzeichnis	73
7.	Anhang : Zusammenstellung der verwandten numerischen Programme	75

1. Einführung und Zielsetzung

Die Untersuchung von Phasenübergängen spielt seit etwa 15 Jahren eine zentrale Rolle in der Festkörperphysik und gewinnt darüber hinaus auch in anderen naturwissenschaftlichen Bereichen zunehmend an Bedeutung /1/. Ein wichtiger Grund dafür ist die Universalität der Phasenübergänge, die besagt, daß verschiedenste Systeme im Bereich ihres Phasenüberganges durch eine einheitliche Theorie beschrieben werden können /2/. Ein charakteristisches Ergebnis dieser Theorie sind Potenzgesetze für thermodynamische Größen, deren Zahlenwerte /3/, die sogenannten kritischen Exponenten, weder von der Art der Teilchen des Systems noch von der Art ihrer Wechselwirkung, sondern nur von zwei in realen Systemen ganzzahligen Größen abhängen: Der räumlichen Dimension des Systems und der Anzahl der Komponenten des Ordnungsparameters unterhalb der Umwandlungstemperatur.

Das erlaubt eine weitgehende Spezialisierung der experimentellen Untersuchung von Phasenübergängen: In der Physik, Chemie und zunehmend auch in der Biologie werden immer neue Phasenübergänge an hochkomplizierten Systemen entdeckt. Häufig ist es dabei nur möglich, den Phasenübergang als Ganzes überhaupt zu erkennen, zu klassifizieren und seine Eigenschaften dann entsprechend den theoretischen Modellen vorherzusagen. Daneben bleibt die Aufgabe bestehen, diese theoretischen Vorhersagen an Hand von Experimenten immer genauer zu überprüfen. Dies ist am besten möglich, wenn man auf relativ gut überschaubare experimentelle Systeme, wie den ferro-paramagnetischen Phasenübergang, zurückgreift.

Bisher ist es noch nicht gelungen, den experimentell und theoretisch am schwierigsten zugänglichen kritischen Exponenten, den Exponenten der Korrelationsfunktion η , oder Fisher-Exponenten, experimentell eindeutig zu bestimmen. Von Tracy und Mc Coy /4/ war 1975 in einer theoretischen Untersuchung nachgewiesen worden, daß alle bisher mit der üblicherweise verwendeten Untersuchungsmethode, der $\vec{q}$ -Abhängigkeit der Streufunktion, gewonnenen Meßwerte für η auf Grund systematischer Fehler unbrauchbar sind. Die Bedeutung des Exponenten η liegt darin, daß er ein Maß für die Abweichung der mikroskopischen

von den klassischen Theorien (Mean-Field, Ornstein-Zernike) ist, denen $\eta=0$ entsprechen würde. Das Ziel dieser Arbeit war es, theoretisch zu untersuchen, ob eine andere mögliche Meßmethode, nämlich die Maximumverschiebung der kritischen Streuung, einwandfreie Ergebnisse liefert, und sie dann mit einem Neutronenstreuexperiment am magnetischen Phasenübergang von Nickel zu testen. Weiterhin sollten auf Grund der hervorragenden experimentellen Bedingungen am Höchstflußreaktor des Instituts Laue-Langevin in Grenoble auch die beiden anderen einem Neutronenstreuexperiment zugänglichen kritischen Exponenten, ν und γ , mit größerer Genauigkeit als bisher ermittelt werden.

Kurze Teile der Arbeit wurden in "Solid State Communications" /5/ publiziert, sowie auf der "V. International Small-Angle Scattering Conference 1980" in Berlin vorgetragen. Die Arbeit wurde zum größten Teil während eines Stipendienaufenthaltes am Institut Laue-Langevin in Grenoble angefertigt.

2. Theoretische Grundlagen zu Phasenumwandlungen und Neutronenstreuung im Hinblick auf eine experimentelle Bestimmung des kritischen Exponenten η

2.1 Phasenumwandlung und kritische Fluktuationen

Kontinuierliche Phasenübergänge sind dadurch charakterisiert, daß die Größe (Ordnungsparameter), deren geordnetes bzw. ungeordnetes kollektives Verhalten die verschiedenen Phasen kennzeichnet, entsprechend einem Potenzgesetz

$$\left. \begin{aligned} M &\sim \left(\frac{-(T-T_c)}{T_c} \right)^\beta \\ &\sim (-\tau)^\beta \end{aligned} \right\} \quad T \leq T_c, \quad \beta > 0, \quad (1)$$

über der reduzierten Temperatur $\tau = (T-T_c)/T_c$ mit dem Exponenten β bei T_c gegen Null geht. Außerdem divergieren viele Materialeigenschaften (nämlich die, die am Ordnungsparameter "ankoppeln" können) im Bereich um T_c gemäß Potenzgesetzen der Form

$$X_i \sim \left| \frac{T-T_c}{T_c} \right|^{-\alpha_i}, \quad \alpha_i \geq 0 \quad +); \quad (2)$$

wobei X_i die betreffende Eigenschaft und α_i den dazugehörigen Exponenten darstellt.

Wie läßt sich dieses Verhalten, das analog bei allen kontinuierlichen Phasenübergängen auftritt, erklären? Bei T_c ist die innere Energie für beide Phasen gleich (stetig und zweimal differenzierbar), was bedeutet, daß sich die Phasen ohne Energieaufwand spontan ineinander umwandeln können. Entsteht dicht bei T_c durch thermische Fluktuationen ein Keim der Phase A zufällig in einem Bereich der Phase B, so kann er sich praktisch ungestört auf Kosten der anderen Phase ausbreiten, und umgekehrt, da wesentliche thermodynamische Größen wie Entropie und spezifisches Volumen sich für $T \rightarrow T_c$ nicht mehr unterscheiden und keine Grenzflächenenergie auftritt. Die so in einem sich ausbreitenden Keim entstehende Korrelation von einem Teilchen zu einem weit entfernten anderen Teilchen ist wesentlich langreichweitiger als die direkte Wechsel-

+)Mit einer Ausnahme: der Exponent der spez.Wärme für $d=3$ ist nach theoretischen Berechnungen /3/ kleiner Null.

wirkung zwischen den Teilchen. Das bedingt, daß die je nach System unterschiedlichen Mechanismen der Wechselwirkung zwischen direkt benachbarten Teilchen keinen Einfluß mehr haben auf die charakteristischen Vorgänge bei einem Phasenübergang. Vielmehr sind die Potenzgesetze Gl.(1,2) und damit auch das divergente Verhalten vieler makroskopischer Materialeigenschaften an einem Phasenübergang nur durch die Größe und Lebensdauer der korrelierten Bereiche (Fluktuationen) bestimmt, die wiederum eine Funktion der Temperaturdifferenz $(T-T_c)$ zur kritischen Temperatur sind (Universalität der Phasenübergänge). Einen Einfluß auf die kritischen Potenzgesetze hingegen haben zwei skalare Parameter, die Größe und Ausbreitung der Fluktuationen bestimmen: Die Dimension des Systems d (Kette, Fläche, Körper, usw.) und die Anzahl der Komponenten n des Ordnungsparameters mit denen das System wechselwirken kann (Universalitätsklassen).

Die Fluktuationen sollen nun im folgenden genauer betrachtet werden, wobei, entsprechend der experimentellen Themenstellung der Arbeit, eine magnetische Bezeichnungsweise verwendet wird. Durch entsprechende Umbenennungen läßt sich die Schreibweise jedoch auch auf andere kontinuierliche Phasenumwandlungen transformieren. Figur 1 soll symbolisch einen Ausschnitt aus einem Ferromagneten darstellen. Im ersten Bild sei die Temperatur weit unterhalb der kritischen Temperatur T_c und es gibt einige kleine statistisch verteilte paramagnetische Cluster in einer ferromagnetischen Umgebung. Bei Annäherung an T_c wachsen die Cluster an, nehmen aber im Vergleich zum Anteil der ferromagnetischen Phase noch einen relativ kleinen Raum ein (Fig.1b). Genau an der kritischen Temperatur (Fig.1c) divergiert die Größe der Cluster auf Grund der verschwindenden Grenzflächenenergie. Trotzdem sind im zeitlichen Mittel und im unendlich großen Idealkristall genauso viele ferromagnetische wie paramagnetische Cluster vorhanden. Oberhalb von T_c ergibt sich ein dazu symmetrisches Verhalten (Fig.1d+e): Es gibt nun ferromagnetische Cluster in einer paramagnetischen Matrix, die mit zunehmendem Temperaturabstand zu T_c kleiner werden. Die Spinorientierungen der einzelnen ferromagnetischen Cluster sind dabei ohne Magnetfeld statistisch verteilt, so daß die makroskopische spontane Magnetisierung Null ist.

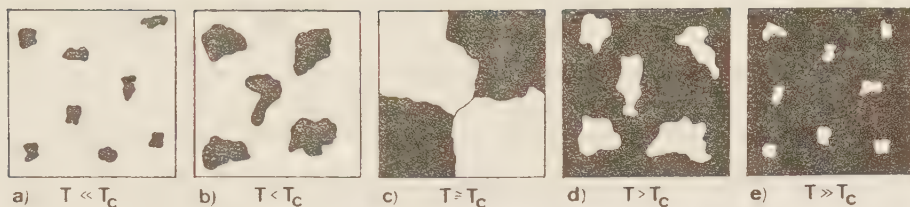


Abb. 1(a-e) Erklärung siehe fortlaufender Text

Die Anschaulichkeit dieser Darstellung birgt jedoch die Gefahr einer falschen Interpretation: Die Cluster haben keine Wände, wie etwa die Blochwände in ferromagnetischen Strukturen weit unterhalb T_C , vielmehr sind die Cluster nur als Wahrscheinlichkeitsverteilung zu sehen. Die "Größe" eines Clusters oder einer Fluktuation ist dabei der doppelte Abstand zweier Spin, deren Wahrscheinlichkeit parallel zu stehen auf $1/e$ abgefallen ist. Außerdem wurde bisher nur eine "Momentaufnahme" der Fluktuationen skizziert: In Wirklichkeit handelt es sich um einen dynamischen Vorgang, denn die Cluster relaxieren sehr schnell (Größenordnung 10^{-12} sec weit weg von T_C und bei Annäherung an T_C etwas langsamer). Die typische Größe und die Lebensdauer gehorchen Potenzgesetzen mit den Exponenten ν bzw ζ :

$$\begin{aligned} \text{"Radius" der Fluktuationen} & \quad \xi \sim \tau^{-\nu} \\ \text{Lebensdauer der Fluktuationen} & \quad \tau_1 \sim \tau^{-\zeta} . \end{aligned} \quad (3)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für Parallelstellung der Spins innerhalb eines Clusters wird durch eine Korrelationsfunktion $G(\vec{r}, t)$ charakterisiert:

$$G(\vec{r}, t) \Big|_{T \gg T_C} \sim \langle M(\vec{r}, t) \cdot M(0, 0) \rangle . \quad (4)$$

$G(\vec{r}, t)$ ist die Wahrscheinlichkeit, am Ort $\vec{r}$ und zur Zeit t die gleiche Magnetisierung in Richtung und Größe anzutreffen wie bei $\vec{r}=0$ und $t=0$. Um ein symmetrisches Verhalten oberhalb und unterhalb von T_C zu haben, werden im ferromagnetischen Bereich die Schwankungen

der Magnetisierung $\{M(\vec{r},t) - \langle M(\vec{r},t) \rangle\}$ bzw. $\{M(o,o) - \langle M(o,o) \rangle\}$ betrachtet.

$$G(\vec{r},t) \sim \langle \{M(\vec{r},t) - \langle M(\vec{r},t) \rangle\} \cdot \{M(o,o) - \langle M(o,o) \rangle\} \rangle . \quad (5)$$

Oberhalb T_c wird die spontane Magnetisierung $\langle M(\vec{r},t) \rangle$ bzw. $\langle M(o,o) \rangle$ zu Null und Gl.(5) geht in die einfache Definition Gl.(4) über.

Eine explizite Berechnung der Korrelationsfunktion $G(\vec{r},t)$, der räumlichen und zeitlichen Struktur der Fluktuationen, als Funktion von Ort, Zeit und Temperatur, ist nur im Rahmen der sogenannten klassischen Theorie (Ornstein-Zernike /6/, van Hove /7/) möglich, die aber die tatsächlichen Verhältnisse nicht korrekt wiedergibt, und deshalb nur als erste Näherung brauchbar ist. Auch für das exakt lösbare 2d-Ising-Modell läßt sich die Korrelationsfunktion nicht analytisch darstellen, sondern nur punktweise numerisch, aber exakt berechnen. In Gl.(6,7) ist der räumliche Anteil (Momentaufnahme) der Korrelationsfunktion in klassischer Näherung und in exakter Schreibweise wiedergegeben. Die Temperaturabhängigkeit steckt implizit in der Korrelationslänge $\xi \sim \tau^{-\nu}$.

$$G(r) \big|_{\text{klassisch}} \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}} \quad \left. \vphantom{\frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}} \right\} T \geq T_c . \quad (6)$$

$$G(r) \big|_{\text{exakt}} \sim \frac{D(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}} \quad \left. \vphantom{\frac{D(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}} \right\} \quad (7)$$

$D(r/\xi)$ ist eine sogenannte universelle Skalenfunktion, von der nur die Grenzwerte genau bestimmbar sind. Für $r \rightarrow \infty$ gilt der klassische Ausdruck $D(r/\xi \rightarrow \infty) = e^{-r/\xi}$ und für $r/\xi \rightarrow 0$, d.h. an T_c geht $D(r/\xi)$ in eine Konstante über. Eingesetzt in Gl.(7) ergibt sich die räumliche Korrelation (Abb.2) genau an der kritischen Temperatur zu

$$G(r, T=T_c) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} . \quad (8)$$

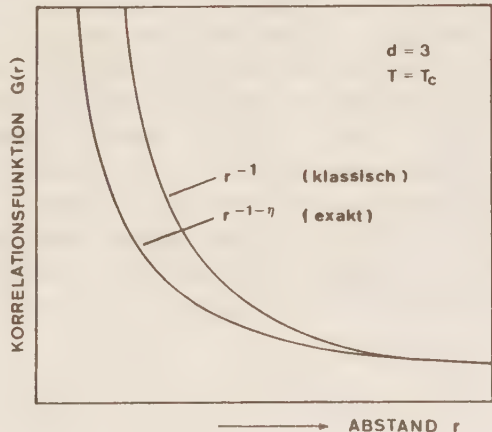
Der so definierte kritische Exponent η wurde erstmals von M.E. Fisher /8/ angegeben, der für das 2d-Ising-Modell die

Korrelation bei T_c proportional zu $r^{-0.25}$ berechnete ($d=2$, $\eta=0.25$). Die Skalentheorie, mit der Kardano /9/ die Entwicklung der modernen Theorien zur Phasenumwandlung einleitete, zeigt, daß η zu den fundamentalen kritischen Exponenten ($\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$) gehört. Nach der Skalenrelation, Gl.(9), sind von diesem Satz von 6 Exponenten nur jeweils zwei unabhängig und die anderen lassen sich daraus bestimmen.

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = \alpha + 2\beta + \gamma = \frac{\gamma}{\nu} + \eta = \alpha + d\nu = 2 \quad +) \quad (9)$$

Der ursprüngliche "Beweis" für Gl.(9) von Kardano /9/ ging von der Annahme aus, daß mathematisch gesehen die thermodynamischen Potentiale die Eigenschaften von homogenen Funktionen haben, was dann tatsächlich zur Gültigkeit von Gl.(9) führt. Zur Erklärung, warum die thermodynamischen Potentiale diese Eigenschaften haben, mußte er jedoch ohne Beweis auf Plausibilitätsbetrachtungen zurückgreifen. Die mathematische Grundlage wurde 1972 von Wilson /10/ durch die Renormalisierungsgruppentheorie gegeben, die Phasenübergänge aus der Untersuchung der Transformationseigenschaften der

Abb.2 Korrelationsfunktion $G(r)$ an der kritischen Temperatur. Die Abweichung ist im Maßstab stark übertrieben.



+) Diese Exponenten beschreiben das divergente Verhalten nahe T_c von spezifischer Wärme (α), Suszeptibilität (γ) und Korrelationslänge (ν), sowie das Verschwinden des Ordnungsparameters (β), die Relation zwischen Ordnungsparameter und dazu konjugiertem Feld (δ) und den Exponenten der Korrelationsfunktion (η). Die letzte, dimensionsabhängige Relation $2-\alpha = d\nu$ "Hyperscaling" ist nicht ganz unumstritten /37/.

Hamiltonfunktion beschreibt, ohne ein Modellsystem Schritt für Schritt durchrechnen zu müssen. Der Exponent η spielt dabei eine wichtige Rolle als anomaler Dimensionsindex für die Skalendimension der Korrelationsfunktion /11/.

Die Berechnung des Exponenten η für dreidimensionale Systeme erweist sich als äußerst schwierig. In älteren Arbeiten mit Hochtemperaturreihenentwicklung, z.B. /12,13/, wurde η meist indirekt aus der Skalenrelation $\eta = 2 - \gamma/\nu$ (siehe Gl.(9)) bestimmt, was auf Grund des kleinen Zahlenwertes $\eta_{d=3} \approx 1/40$ leicht zu relativ großen Fehlern führt. Bei der ϵ -Entwicklung ($\epsilon = 4-d$) aus dem Renormalisierungsgruppenansatz /14/ erscheint, im Gegensatz zu allen anderen Exponenten, für η das erste von Null verschiedene Glied erst bei ϵ^2 . Die derzeit besten theoretischen Rechnungen der Exponenten (siehe Kap.4.4) von Le Guillou und Zinn-Justin /3/ benutzen einen der Wilson'schen Renormalisierungsgruppe ähnlichen feldtheoretischen Ansatz.

Experimentell ist eine Beobachtung der Fluktuationen und damit eine direkte Bestimmung der Exponenten η und ν nur durch ein Streuexperiment, und speziell im magnetischen Fall durch ein Neutronenstreuexperiment möglich. Es gibt bisher eine Anzahl von Ergebnissen für η aus Streuexperimenten, die jedoch auf Grund prinzipieller Zweifel an der Art der experimentellen Durchführung fraglich sind. Die Diskussion dieser Experimente im Vergleich zu der alternativen Methode, die in dieser Arbeit erstmals erfolgreich durchgeführt wird, wird in Kap. 2.3 und 2.4 wieder aufgegriffen, während im folgenden Absatz 2.2 die allgemeinen Zusammenhänge zwischen Neutronenstreuung und kritischen Fluktuationen zusammengestellt sind.

2.2. Neutronenstreuung an kritischen Fluktuationen

Wie können die kritischen Fluktuationen und damit die Korrelationsfunktion dem Experiment zugänglich gemacht werden? Eine direkte Beobachtung (z.B. mit einem Mikroskop) ist nicht möglich, obwohl die Größe der Fluktuationen genügend nahe an T_c ohne weiteres dazu ausreichend wäre. Jedoch ist die Lebensdauer so kurz (Größenordnung 10^{-12} bis 10^{-10} sec sehr nahe an T_c), daß sie ein optisches Instrument nicht sichtbar machen kann. Damit bleibt als einzige Beobachtungsmöglichkeit ein Streuexperiment, das die folgenden Voraussetzungen erfüllen muß:

- (i) Die Wellenlänge der Strahlung muß die gleiche Größenordnung haben wie die räumliche Ausdehnung der Fluktuationen (Untersuchung der statischen Korrelationsfunktion).
- (ii) Die reziproke Frequenz der Strahlung muß etwa so groß sein wie die Lebensdauer der Fluktuationen (Untersuchung der dynamischen Korrelationsfunktion).
- (iii) Die Strahlung muß am Ordnungsparameter ankoppeln.
- (iv) Zur Untersuchung von dreidimensionalen Systemen darf die Strahlung nicht stark absorbiert werden.

Aufgrund ihres magnetischen Moments sind Neutronen die ideale Sonde zur Untersuchung von magnetischen Phasenübergängen. "Kalte" Neutronen mit einer Wellenlänge von 5 bis $10 \text{ \AA}$ und einer Energie von etwa 1 meV (entspricht Frequenz $\omega \approx 10^{12}$ sec) erfüllen ausgezeichnet die beiden ersten Bedingungen im Vergleich zu typischer Größe und Lebensdauer von Fluktuationen. Der kleine Wirkungsquerschnitt der meisten Neutronenstreuprozesse und die damit verbundene Durchlässigkeit der Proben gewährleistet eine gute Beobachtungsmöglichkeit des "bulk" - Verhaltens im dreidimensionalen Kristall.

2.2.1 Streuquerschnitt in 1. Born'scher Näherung

Der größte Teil dieses Kapitels kann für einen Leser, der in dieser Arbeit nur an der Diskussion zur Bestimmung des kritischen Exponenten η interessiert ist, ohne Folgen für das Verständnis der weiteren Kapitel übergangen werden. Es wird im folgenden die Ableitung des Streugesetzes für die kritische Streuung ab initio, vom Hamiltonoperator her, skizziert. Das Endergebnis dieser Herleitung wird in Gl.(22) gebracht, d.h. bis zu dieser Stelle kann der Text gegebenenfalls überschlagen werden. Der Grund für diese allgemeine Darstellung des Streugesetzes liegt darin, daß in allen einschlägigen Lehrbüchern über Neutronenstreuung der Begriff "Streugesetz in 1. Born'scher Näherung" verwendet wird, ohne sauber zu trennen, was Born'sche Näherung ist, was Voraussetzungen für ihre Gültigkeit und was Folgerungen aus ihr sind.

Der Hamilton-Operator für die Streuung von Neutronen an einem Festkörper läßt sich in allgemeiner Form darstellen:

$$\hat{H} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \quad . \quad (10)$$

Dabei stellt der erste Term den Operator für die kinetische Energie des Neutrons und der zweite das Wechselwirkungspotential zwischen Neutron und Probe dar. Um die folgenden Formeln überschaubar zu halten, sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen, daß die Streuung des Neutrons am Potential V elastisch erfolgt. Einsetzen von Gl.(10) in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E(\vec{r})\Psi(\vec{r})$ ergibt

$$(\Delta + k^2) \Psi(\vec{r}) = W(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \quad , \quad (11)$$

mit den Abkürzungen $k^2 = 2mE\hbar^{-2}$ und $W(r) = 2mV(r)\hbar^{-2}$. Als mathematischer Kunstgriff kann die rechte Seite von Gl.(11) als Störung des Ausdrucks auf der linken Seite angesehen werden. Dann läßt sich die Gleichung nach der Methode der Green'schen Funktionen wie folgt lösen:

(i) Man sucht die Lösung $\Psi_0(\vec{r})$ der linken Seite von Gl.(11), d.h. der homogenen Differentialgleichung $(\Delta + k^2)\Psi = 0$,

$$\Psi_0 = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad .$$

(ii) Man bestimmt die Greenfunktion $g(\vec{r}, \vec{r}')$ der homogenen Differentialgleichung, die in Verbindung mit dem Differentialoperator $\hat{L}$ der homogenen Differentialgleichung (in diesem speziellen Fall $\hat{L} = (\Delta + k^2)$) der Bedingung

$$\hat{L}(g(\vec{r}, \vec{r}')) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

genügen muß. Für den obigen Differentialoperator $\hat{L} = (\Delta + k^2)$ lautet dann die Greenfunktion

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = - \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} .$$

(iii) Nach Kenntnis von Ψ_0 und $g(\vec{r}, \vec{r}')$ ist dann die Lösung der inhomogenen Differentialgleichung Gl.(11) definiert als Integralgleichung

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \int d\vec{r}' g(\vec{r}, \vec{r}') W(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) .$$

(iv) Diese Integralgleichung kann iterativ gelöst werden als Reihenentwicklung

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} \int d\vec{r}' g(\vec{r}, \vec{r}') W(\vec{r}) \Psi_{n-1}(\vec{r}) . \quad (12)$$

Die Reihenentwicklung Gl.(12) ist die n-te Born'sche Näherung, wobei n die Anzahl der mitgenommenen Glieder aus der Summe bedeutet. In expliziter Schreibweise lauten die ersten Glieder für die gestreute Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) = & \Psi_0(\vec{r}) + \\ & + \int d\vec{r}' g(\vec{r}, \vec{r}') W(\vec{r}') \Psi_0(\vec{r}') + \\ & + \int d\vec{r}' g(\vec{r}, \vec{r}') W(\vec{r}') \int d\vec{r}'' g(\vec{r}', \vec{r}'') W(\vec{r}'') \Psi_0(\vec{r}'') . \end{aligned} \quad (13)$$

In der Impulsdarstellung lassen sich die entsprechenden Matrixelemente sehr anschaulich durch Feynman-Graphen darstellen:

$$\text{Diagram 1} = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \quad (13a)$$

Der Streuprozess eines Neutrons am Potential V bzw. W kann also dargestellt werden als Überlagerung von n Termen, wobei der n -te Term bedeutet, daß ein Neutron mit dem Impuls $\hbar\vec{k}$ einläuft, n -mal an einem Potential (die Green'sche Funktion der obigen Integralgleichung kann als Quellendarstellung des Potentials gesehen werden) gestreut wird (jedes ineinander geschachtelte Integral von Gl.(13) entspricht einer Streuung) und mit dem Impuls $\hbar\vec{k}'$ wieder ausläuft. Nur das erste Integral in Gl.(13) und damit die 1. Born'sche Näherung läßt sich noch relativ einfach berechnen, während die höheren Glieder mit einfachen Methoden nicht mehr auszuintegrieren sind. Explizit berechnet lautet die Wellenfunktion in 1.Born'scher Näherung:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{e^{i\vec{k}'\vec{r}}}{4\pi r} \int d\vec{r}' e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'} W(\vec{r}') . \quad (14)$$

Nach dieser mathematischen Einführung der 1.Born'schen Näherung lassen sich nun ihre Eigenschaften in Bezug auf physikalische Probleme untersuchen, und die Voraussetzungen bestimmen, unter denen sie angewendet werden darf:

(i) Die Wellenfunktion in 1.Born'scher Näherung setzt sich entsprechend Gl.(14) zusammen aus einer einlaufenden ebenen Welle

$\psi_0 = e^{i\vec{k}\vec{r}}$ und einer auslaufenden Kugelwelle $\psi_1 = -f(\vec{q}) \frac{e^{i\vec{k}'\vec{r}}}{r}$, deren Amplitude $f(\vec{q}) = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{q}\vec{r}'} W(\vec{r}')$ nur vom Impulsübertrag des Neutrons $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}-\vec{k}')$ und vom Potential $W(\vec{r})$ abhängt.

(ii) Die 1.Born'sche Näherung entspricht einem Streuvorgang mit Einfachstreuung, da nur der erste Term von Gl.(13) berücksichtigt wird. Die Wechselwirkung zwischen Streuer und gestreutem Teilchen muß also so gering sein, daß Mehrfachstreuung vernachlässigbar ist. Für Neutronen ist diese Voraussetzung fast immer (Ausnahmen: Cadmium, Bor, ect.) erfüllt, da auf Grund der fehlenden elektrischen Ladung auch relativ dicke Proben für Neutronen weitgehend transparent sind.

(iii) Die Reichweite des Wechselwirkungspotentials muß sehr klein sein im Vergleich zur Wellenlänge des gestreuten Teilchens und der Potentialtopf sehr tief gegenüber der Energie des Teilchens. Damit läßt sich der Streuvorgang hinreichend genau durch die Wellenfunktionen vor bzw. nach der Streuung beschreiben, ohne explizite Kenntnis der Vorgänge im Bereich der Reichweite des Potentials (anschaulich aus den Feynman-Graphen (Gl.13a), wenn nur das erste

Glied betrachtet wird). Für Streuung langsamer Neutronen ist diese Bedingung ebenfalls erfüllt.

Aus der oben definierten Amplitude $f(\vec{q})$ der auslaufenden Kugelwelle wird nun der differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ berechnet. Er ist definiert als Teilchenstrom, der durch eine Kugeloberfläche mit Radius R in Richtung des ausfallenden Streuvektors $\vec{k}'$ in den Raumwinkel $d\Omega$ austritt, dividiert durch den Strom der einfallenden Teilchen. Für quantenmechanische Systeme wird der Teilchenstrom ersetzt durch einen "Wahrscheinlichkeitsstrom" $|\psi|^2 v_n$ (Geschwindigkeit des Neutrons $v_n = \hbar k/m$). Damit ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\psi_1|^2 v_1 R^2}{|\psi_0|^2 v_0} = \frac{k'}{k} |f(\vec{q})|^2, \quad (13)$$

oder verallgemeinert der doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung in den Raumwinkel $d\Omega$ und in ein Energiefenster dE ($dE = \hbar d\omega$)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k'}{k} |f(\vec{q})|^2 \delta\left(\frac{E-E'}{\hbar} - \omega\right), \quad (14)$$

oder $f(\vec{q})$ eingesetzt

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \frac{k'}{k} \left| \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} v(\vec{r}) e^{i\vec{k}'\vec{r}} \right|^2 \delta\left(\frac{E-E'}{\hbar} - \omega\right). \quad (15)$$

Für die (nicht magnetische) Streuung von thermischen Neutronen an Atomkernen ist $V(\vec{r})$ ein skalarcs Potential (Fermi-Pseudo-Potential), das sich als δ -Funktion am Ort der Kerne $\vec{R}_j$ ausdrücken läßt, wobei die Stärke der Wechselwirkung durch eine Konstante b (Streulänge) bezeichnet wird:

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \sum_j \delta(\vec{r}-\vec{R}_j). \quad (16)$$

Dieses Potential wird in Gl.(15) eingesetzt, das Integral über der Deltafunktion gelöst, und mit $\frac{1}{N}$ multipliziert, um den Streuquerschnitt pro Atom zu erhalten. Weiterhin muß über die möglichen

Anfangszustände λ des Targets gemittelt (Wahrscheinlichkeit $p(\lambda)$) und über die Endzustände λ' summiert werden.

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\Omega} = \frac{1}{N} \frac{k'}{k} b^2 \sum_{\lambda, \lambda'} p(\lambda) \left| \sum_{j=1}^N \langle \lambda' | e^{i\vec{q}\vec{R}_j} | \lambda \rangle \right|^2 \delta\left(\frac{E-E'}{\hbar} - \omega\right) \quad (17)$$

Für die magnetische Streuung der Neutronen an den ungepaarten Elektronen eines Festkörpers wird der Ausdruck Gl.(16) für das Wechselwirkungspotential ein sehr aufwendiger vektorieller Ausdruck, wobei nun die Streulänge b nicht mehr eine für jedes Isotop spezifische Naturkonstante ist, sondern sich für jedes magnetische Atom berechnen läßt. Auf die ausführliche Herleitung /15/ soll hier verzichtet und nur das Ergebnis verwendet werden. In den oben dargestellten Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt muß die Streulänge b (für Kernstreuung) ersetzt werden durch den Ausdruck

$$b^2 \rightarrow \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\gamma_n e^2}{m_e c^2} \right)^2 \left(\frac{g}{2} F_f(\vec{q}) \right)^2 (1 - \tilde{q}_\alpha^2) \quad (18)$$

Die dabei auftretenden Konstanten sind $\gamma_n = -1.91$ (magn. Moment des Neutrons in Kernmagnetonen), $r_0 = e^2/(m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ (klass. Elektronenradius) und g der Landéfaktor. Die Größe $F_f(\vec{q})$ ist der magnetische Formfaktor, der eine Abnahme der magnetischen Streuung mit wachsendem Streuvektor $\vec{q}$ angibt. Der vektorielle Charakter der magnetischen Streuung wird charakterisiert durch den Term $(1 - \tilde{q}_\alpha^2)$, der den gesamten Ausdruck für Streuvektor $\vec{q}$ parallel zur Magnetisierungsrichtung auslöscht und senkrecht dazu maximal verstärkt (die $\tilde{q}_\alpha$ sind die Komponenten des Einheitsvektors $\vec{q}/|\vec{q}|$ in Richtung des Streuvektors). Der Ausdruck gilt in dieser Form für unpolarisierte Neutronen als Mittelung über die Polarisationszustände. Weiterhin gibt es für unpolarisierte Neutronen keine Interferenzen zwischen magnetischer und Kernstreuung, so daß im folgenden nur der magnetische Anteil des Streuquerschnitts untersucht wird.

Nach Einsetzen der magnetischen Streulänge Gl.(18) in die allgemeine Beziehung für den Wirkungsquerschnitt, Gl.(17), ergibt sich

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{\gamma_n e^2}{m_e c^2} \frac{g}{2} F_f(\vec{q}) \right)^2 \sum_{\alpha=1}^3 (1 - \tilde{q}_{\alpha}^2) \hat{S}^{\alpha}(\vec{q}, \omega), \quad (19)$$

wobei die Vorfaktoren alle experimentellen bzw. die Neutron-Probe-Wechselwirkung betreffenden Faktoren enthalten, während die Streufunktion $\hat{S}^{\alpha}(\vec{q}, \omega)$, die im weiteren betrachtet werden soll, nur von der inneren Struktur der Probe abhängt, d.h. die Physik des Experiments enthält. In der Tat erweist sich nach einigen Umformungen (siehe z.B./15/), daß der Ausdruck für die α -Komponente der Streufunktion,

$$\hat{S}^{\alpha}(\vec{q}, \omega) = \sum_{\lambda, \lambda'} p(\lambda) \left| \sum_{j=1}^N \langle \lambda' | e^{i\vec{q}\vec{R}_j} | \lambda \rangle \right|^2 \delta\left(\frac{E-E'}{\hbar} - \omega\right),$$

als α -Komponente der Fouriertransformierten einer Korrelationsfunktion, z.B. $G^{\alpha}(\vec{r}, t)$ aus Gl.(5) für ein System im Bereich eines Phasenübergangs, geschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} \hat{S}^{\alpha}(\vec{q}, \omega) &= \int dt e^{-i\omega t} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{R}} G^{\alpha}(\vec{r}, t) = \\ &= \int dt e^{-i\omega t} \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{R}} \langle \{M^{\alpha}(\vec{R}, t) - \langle M^{\alpha}(\vec{R}, t) \rangle\} \cdot \{M^{\alpha}(0, 0) - \langle M^{\alpha}(0, 0) \rangle\} \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Die räumlich-zeitliche Korrelationsfunktion stellt einen Zusammenhang zwischen einem Vorgang am Ort $\vec{R}=0$ und zur Zeit $t=0$ und einem am Ort $\vec{R}$ zur Zeit t dar. Diese doppelte Abhängigkeit läßt sich aufspalten in zwei Responsefunktionen:

(i) $\chi^{\alpha}(\vec{q})$ ist die allgemeine Suszeptibilität (z.B. eines Spinsystems) in α -Richtung als Antwort auf ein angelegtes statisches Feld mit Wellenvektor $\vec{q}$. $\chi(\vec{q})$ entspricht dann der Fouriertransformierten einer statischen Korrelationsfunktion $G(\vec{r})$.

(ii) $F^{\alpha}(\vec{q}, \omega)$ beschreibt die Relaxation des Systems auf ein plötzliches Abschalten des Feldes. Mit der Normierung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F^{\alpha}(\vec{q}, \omega) = 1, \quad q = \text{const.}, \quad (21)$$

gilt dann $\hat{S}^{\alpha}(\vec{q}, \omega) = \chi^{\alpha}(\vec{q}, \omega) F^{\alpha}(\vec{q}, \omega)$.

Eingesetzt ergibt sich die "Master-Formel" für die Streuung an magnetischen Fluktuationen /15/:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{\gamma_n e^2}{m_e c^2} \frac{g}{2} F_f(\vec{q}) \right)^2 c_B(\omega) \sum_{\alpha=1}^3 (1 - \tilde{q}_\alpha^2) \gamma^\alpha(\vec{q}) F^\alpha(\vec{q}, \omega) \quad . \quad (22)$$

Der Vollständigkeit halber ist in Gl.(22) noch der "Detailed Balance Factor" $c_B(\omega) = \frac{\exp(\beta \hbar \omega)}{1 - \exp(\beta \hbar \omega)}$ hinzugefügt mit $\beta = 1/k_B T$ (Boltzmann-Konstante k_B), der das Verhältnis zwischen Energiegewinn- und Verlustprozessen beschreibt. Für kleine Energieüberträge, wie sie bei der kritischen Streuung wegen der relativ engen Spektralfunktion $F(\vec{q}, \omega)$ vorkommen, gilt praktisch immer $c_B(\omega) \approx 1$.

Wie läßt sich nun dieser komplizierte Ausdruck, Gl.(22), vereinfachen, um ihn mit einem Experiment vergleichen zu können?

(i) Die Messungen wurden für Temperaturen oberhalb T_c durchgeführt, so daß es keine bevorzugte Richtung der Magnetisierung gibt und über die Koordinatenrichtungen gemittelt werden kann

$$\sum_{\alpha=1}^3 (1 - \tilde{q}_\alpha^2) \chi^\alpha(\vec{q}) F^\alpha(\vec{q}, \omega) \longrightarrow \frac{2}{3} \chi(\vec{q}) F(\vec{q}, \omega) \quad . \quad (23)$$

(ii) Die Messungen wurden bei extrem kleinem Streuvektor $\vec{q}$ durchgeführt, so daß für den magnetischen Formfaktor gilt

$$F_f(\vec{q}) = 1 \quad .$$

(iii) Die Messungen wurden an einem Zweiachsendiffraktometer durchgeführt, das über keine Energieauflösung verfügt, sondern über alle Energiegewinn- und Energieverlustvorgänge integriert. Diese Integration ist für $\vec{q} = \text{const}$ auf 1 normiert (Gl.21)). Tatsächlich wird aber, durch die Geometrie des Streuvorgangs bedingt, beim Zweiachsendiffraktometer nicht für konstantes $\vec{q}$, sondern für konstanten Streuwinkel integriert. Für die speziellen Bedingungen dieses Experiments (sehr kleine Streuwinkel und damit verbunden enge Spektralfunktion) erfolgt die Integration jedoch bei quasi-konstantem $\vec{q}$ und gehorcht damit in sehr guter Näherung der Normierung $\int d\omega F(\vec{q}, \omega) = 1$. Dann gilt die quasi-elastische Näherung:

$$\int d\omega F(\vec{q}, \omega) \chi(\vec{q}) \longrightarrow \chi(\vec{q}) \quad . \quad (24)$$

(iv) Da es praktisch nicht möglich ist, ein Kleinwinkelstreuexperiment mit komplizierter Streukammer (Ofen) so zu eichen, daß in absoluten Einheiten (barn) des Streuquerschnitts gemessen werden kann, entfallen die Konstanten zugunsten eines "proportional"

$$\left(\frac{\gamma_n e^2}{m_e c^2} \frac{g}{2} \right)^2 \longrightarrow " \sim " . \quad (25)$$

Zusammenfassung von (i) bis (iv) ergibt, daß der Streuquerschnitt eines Kleinwinkelstreuexperiments direkt der verallgemeinerten Suszeptibilität $\chi(\vec{q})$ und damit der fouriertransformierten statischen Korrelationsfunktion $\int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{r}} G(\vec{r})$ proportional ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \chi(\vec{q}) \sim \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{r}} G(\vec{r}) . \quad (26)$$

Nach dieser Zusammenfassung der wichtigsten Grundlagen der Neutronenstreuung, soweit sie für dieses Experiment von Bedeutung sind, wird im folgenden die fouriertransformierte Korrelationsfunktion für einen Phasenübergang untersucht, sowie deren theoretische Ansätze und die Möglichkeit, den kritischen Exponenten η damit aus einem Neutronenstreuexperiment zu bestimmen.

2.3. Die fouriertransformierte Spinkorrelationsfunktion $\hat{G}(\vec{q})$ und die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$

Im Temperaturbereich eines Phasenübergangs beschreibt der statische Anteil $\hat{G}(\vec{q})$ der fouriertransformierten Spinkorrelationsfunktion im q -Raum (bzw. die Streufunktion $\chi(\vec{q})$) die räumliche Struktur der Fluktuationen und deren Temperaturverhalten durch die kritischen Exponenten γ, ν und η . Um sich ein erstes Bild vom "Aussehen" der Fluktuation im fouriertransformierten Raum zu machen, ist es zweckmäßig, die allgemeinen Eigenschaften an Hand der Laue-Aufnahme eines Kristallgitters zu veranschaulichen:

(i) Alle Fluktuationen im durchstrahlten Volumen der Probe werden in eine Streufigur abgebildet, analog zu den Verhältnissen bei der Laue-Aufnahme eines Einkristalls, wo alle translationsinvarianten Einheitszellen in eine zentralsymmetrische Figur abgebildet werden (Abb.3 und 4).

(ii) Die Streufigur hat eine Halbwertsbreite von $1/\xi$, wenn 2ξ der typische "Durchmesser" der Fluktuation ist, analog dazu, daß die Zahlenwerte der Miller'schen Indizes im Streubild der Laue-Aufnahme proportional zu den reziproken Abständen im Kristallgitter sind (Abb. 3 und 4).

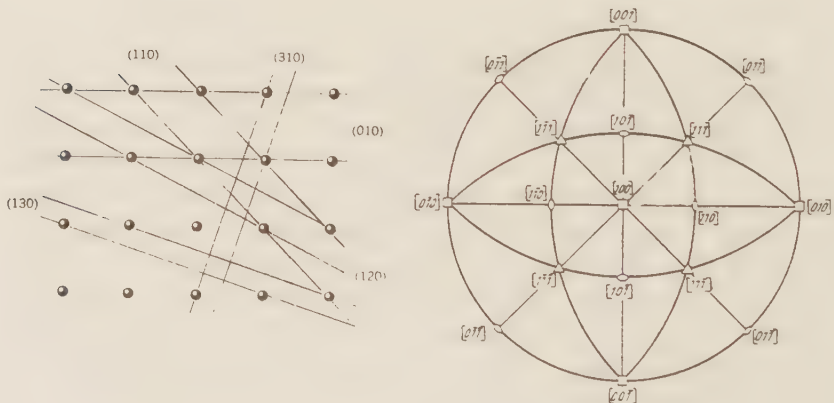


Abb.3: Translationsinvariantes Kristallgitter im $\vec{r}$ -Raum und dazugehörige Laue-Aufnahme im fouriertransformierten $\vec{q}$ -Raum

(iii) Nach dem Fluktuations-Dissipations Theorem /20/ sind die Fluktuationen mit der isothermen Suszeptibilität verknüpft. Speziell ist die Höhe der Streufigur bei $q=0$ der statischen Suszeptibilität $\chi_0 \tau^{-\gamma}$ proportional (Abb.4).

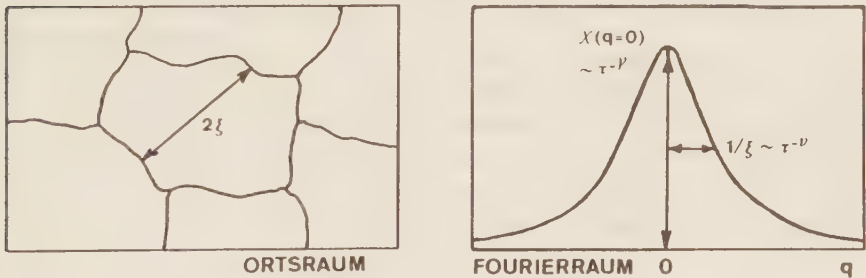


Abb.4 Schematische Darstellung von Fluktuationen im Ortsraum und im q -Raum der Streufigur.

Der Weg für eine experimentelle Bestimmung der Exponenten γ und ν aus einem Neutronenstreuexperiment liegt damit klar auf der Hand. Die Untersuchung der Temperaturabhängigkeit von Halbwertsbreite und der auf $\vec{q} \rightarrow 0$ extrapolierten Streuintensität (Streuung genau in Vorwärtsrichtung, $\vec{q} \equiv 0$, ist wegen überlagertem Primärstrahl nicht meßbar) liefert $\xi(T)$ bzw. $\chi(T)$ und damit aus den entsprechenden Potenzgesetzen die Exponenten ν und γ . Wesentlich schwieriger ist es, den Exponenten η zu bestimmen, der in der Form der Streukurve enthalten ist. Die klassische Theorie (Ornstein-Zernike /6/) berechnet für die q -Abhängigkeit der kritischen Streuung eine mathematisch einfache Beziehung: Eine Lorentzkurve mit Höhe $\chi(q=0, T)$ und Halbwertsbreite $2/\xi(T)$

$$\hat{G}_{\text{klass.}}(q, T) = \frac{\chi(q=0) \xi(T)^{-2}}{\xi(T)^{-2} + q^2} \quad (27)$$

Unter der im Rahmen der Ornstein-Zernike Theorie gültigen Annahme $\gamma=2\nu$ reduziert sich der Zähler von Gl.(27) zu einer Konstanten^{+) (} $\chi_0 \tau^{-\gamma} \xi_0^{-2} \tau^{2\nu} = \chi_0 \xi_0^{-2}$) und damit nimmt Gl.(27) die häufig zitierte einfache Form an

$$\hat{G}_{\text{klass.}}(q, T) = \frac{1}{\xi(T)^{-2} + q^2} \quad (28)$$

Das ist die Fouriertransformierte von $G(r)|_{\text{klass}}$ aus Gl.(6). Weitergehende theoretische Betrachtungen und Experimente zeigen jedoch, daß im allgemeinen Abweichungen von dieser einfachen Lorentzform auftreten, die mit dem kritischen Exponenten η verknüpft sind. In üblicher Schreibweise kann $\hat{G}(q, T)$ in der folgenden Form dargestellt werden /16,17/:

$$\hat{G}(q, T) \sim \xi(T)^{2-\eta} \hat{D}(y), \quad y = q\xi \quad (29)$$

$$\hat{D}(y) = \frac{1}{1 + y^2 - 4\eta Q(y^2)y^4} \quad (30)$$

Dabei ist der erste Term in Gl.(29), $\xi(T)^{2-\eta}$, nach der Skalenregel Gl.(9) der statischen Suszeptibilität $\chi(q=0, T)$ proportional. Der zweite Term ist die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$, die zur Skalenfunktion $D(r/\xi)$ aus Gl.(6) fouriertransformiert ist. Aus der Skalenhypothese von Kadanoff /9/ folgt für $D(y)$ die Eigenschaft, daß im kritischen Bereich um einen Phasenübergang die analytische Form von $\hat{D}(y)$ nicht mehr eine Funktion der beiden Variablen q und T ist, sondern nur mehr von einer einzigen, dimensionslosen Variablen $y = q\xi(T)$ abhängt. Praktisch bedeutet dies, daß die experimentell gemessenen Intensitäten als Funktion des Streuvektors, $I(q)$, für verschiedene Temperaturen durch geeignete Koordinatentransformation in eine

+) Genau genommen haben auch die Amplituden χ_0 und ξ_0 eine sehr schwache Temperaturabhängigkeit, die jedoch stetig über T_C hinweg verläuft und deshalb für Experimente und Rechnungen im engen Bereich um T_C nicht berücksichtigt werden braucht.

einzigste Kurve übergeführt werden können. Die mathematische Darstellung von $\hat{D}(y)$ ist nicht als geschlossener analytischer Ausdruck berechenbar. Die Gl. (30) gibt $\hat{D}(y)$ in einer häufig verwendeten Form wieder, wobei $Q(y^2)$ ein extrem aufwendiger Ausdruck ist, der auch mit Renormierungsgruppen- ϵ -Entwicklung nur für sehr kleine und sehr große y dargestellt werden kann [16,17]. Nur die jeweils ersten Glieder dieser Entwicklungen sind auf einfache Weise zu bestimmen:

$$\hat{D}(y) = \begin{cases} \frac{1}{1+y^2} & \text{für } y \rightarrow 0 \\ C_1 y^{-2+\eta} & \text{für } y \rightarrow \infty \end{cases} \quad (31)$$

Die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ entspricht für sehr kleine y einer einfachen Lorentzform, während der Ausdruck für große y aus der Definitionsgleichung für η (Gl. (8)) abgeleitet ist. C_1 ist eine Konstante.

Von Theoretikern, insbesondere M.E. Fisher, wurde immer wieder versucht, geschlossene approximative Formeln für die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ anzugeben, die im ganzen Definitionsbereich $0 < y < \infty$ Gültigkeit haben. Die wichtigsten sind im folgenden angegeben:

$$1. \text{ Lorentz-Approximation} \quad \hat{D}_{LO}(y) = \frac{1}{1+y^2} \quad (32)$$

$$2. \text{ Fisher-Approximand} \quad \hat{D}_F(y) = \frac{1}{(1+y^2)^{1-\eta/2}} \quad (33)$$

$$3. \text{ Fisher-Burford-Approx.} \quad \hat{D}_{FB}(y) = \frac{(1+\phi^2 y^2)^{\eta/2}}{1+y^2} \quad (34)$$

$$4. \text{ Fisher-Langer-Approx.} \quad \hat{D}_{FL}(y) = C_1 y^{-2+\eta} \{1+y^{-1/\nu} (C_2 y^{\alpha/\nu} + C_3)\} \quad (35)$$

ϕ , C_1 , C_2 , und C_3 sind Konstanten, und α der kritische Exponent der spezifischen Wärme. Durch Anfügen von experimentellen Ergeb-

nissen an eine der obigen Formeln, meist an Gl.(33), weil mathematisch am einfachsten, konnten nun die hauptsächlich interessierenden Größen - die Exponenten ν und η - bestimmt werden. Von Tracy und Mc Coy /4/ wurde 1975 erstmals die Frage aufgeworfen, ob speziell für den Exponenten η der so gewonnene Zahlenwert nicht auch von der Wahl des Approximanden beeinflusst wird. Im folgenden Kapitel wird aus theoretischer Sicht die Gültigkeit der verschiedenen Approximanden untersucht und, um das Ergebnis vorwegzunehmen, gezeigt, daß eine Bestimmung von η aus einem Fit von Daten an einen der obigen Approximanden im allgemeinen zumindest zweifelhaft ist. In Kap.2.4 wird dann als alternative Methode die experimentelle Bestimmung von η aus der Verschiebung des Maximums der kritischen Streuung zu höheren Temperaturen für wachsenden Streuvektor ($T_{\max}(q) > T_c(q=0)$) entwickelt.

2.3.1 Gültigkeitsbereiche der Approximanden für $\hat{D}(y)$
 und kritische Bewertung der bisher üblichen η -Bestimmung

Abschätzungen über die Gültigkeit bzw. den Definitionsbereich der verschiedenen Approximanden, Gl.(32-35), wurden erstmals von Tracy und McCoy /4/ durchgeführt. Sie verwendeten zum Vergleich die Skalenfunktion des exakt lösbaren 2d-Ising-Modells, die von ihnen punktweise berechnet und tabelliert wurde. Eine analytisch geschlossene Darstellung ist auch für das 2d-Ising-Modell nicht bekannt. Diese so punktweise berechneten exakten Werte der Skalenfunktion wurden dann mit den entsprechenden Werten der Approximanden (die darin vorkommenden Konstanten ϕ , C_1, C_2 und C_3 wurden ebenfalls exakt für 2d-Ising bestimmt) verglichen und der Fehler prozentual festgestellt. Die Ergebnisse sind in Tab.1 wiedergegeben, wobei die erste Spalte die Bezeichnung des Approximanden entsprechend Gl.(32-35) angibt und die erste Zeile den maximalen Fehler für den darunter angegebenen y -Bereich.

Tabelle 1 Genauigkeit der Approximanden von $\hat{D}(y)$ für das 2d-Ising Modell für $T \geq T_c$ /4/.

Approximand	Fehler der Approximanden		
	0.1 %	1 %	5 %
$\hat{D}_{LO}(y)$	$0 \leq y < 1.1$	$0 \leq y < 4.0$	$0 \leq y < 11.2$
$\hat{D}_F(y)$	$15900 < y < \infty$	$1170 < y < \infty$	$163 < y < \infty$
$\hat{D}_{FB}(y)$	$0 \leq y < 1.1$ $15900 < y < \infty$	$0 \leq y < 4.2$ $1145 < y < \infty$	$0 \leq y < 15.0$ $138 < y < \infty$
$\hat{D}_{FL}(y)$	$15.7 < y < \infty$	$5.4 < y < \infty$	$2.5 < y < \infty$

Nun aber ist der Bereich der y -Werte, die experimentell realisiert werden können, nach oben stark beschränkt, da ξ aus experimentellen Gründen (Temperaturkonstanz des Ofens) nicht beliebig anwachsen kann, und der Streuwinkel bzw. der Betrag des Streuvektors $|\vec{q}|$ aus theoretischen und experimentellen Gründen klein bleiben muß. Außerdem fällt die Zählrate auf Grund des Streugesetzes sehr schnell mit y ab (bei $y = 10$ weniger als $1/100$ der Zählrate bei $y = 0$) und kommt damit rasch in die gleiche Größenordnung wie die Zählrate des Untergrundes. Realistisch ist ein maximales y von 10 bis 15 für magnetische Systeme und von 50 bis 70 für Lichtstreuexperimente oder Substanzen mit sehr großer Amplitude ξ_0 der Korrelationslänge. Dabei fällt aber immer die überwiegende Mehrzahl der Meßpunkte bei kleinen bis sehr kleinen y an und nur einige und zudem mit großen Fehlern behaftete Meßpunkte erreichen die obere Grenze.

Tracy und Mc Coy gingen davon aus, daß eine Bestimmung des Exponenten η durch Anfitten von Meßwerten an einen der Approximanden nur dann sinnvoll ist, wenn die Meßwerte in einem y -Bereich vorliegen, in dem der Approximand möglichst gut ist, entsprechend Tabelle 1. Sie belegten diese an sich schon selbstverständliche Annahme noch dadurch, daß sie ihre gerechneten exakten "Daten" aus dem 2d-Ising Modell in verschiedenen y -Bereichen an die verschiedenen Approximanden fitteten, mit dem Ergebnis, daß die so bestimmten Werte für η teilweise stark vom "Sollwert" $\eta = 0.25$ für das 2d-Ising Modell abwichen, solange die "Daten" nicht im optimalen Gültigkeitsbereich des betreffenden Approximanden (Tabelle 1) lagen.

Der Schluß von diesen simulierten experimentellen Daten auf echte Experimente liegt nahe: Wenn ein Experiment den Fisher- oder Fisher-Burford-Approximanden zur Interpretation von Meßergebnissen verwendet, so stimmen experimenteller y -Bereich und gültiger Definitionsbereich des Approximanden nicht überein (der "gute" Definitionsbereich des FB-Approximanden für sehr kleine y in Tab.1 liefert kein η , da in diesem Bereich der Zähler des FB-Ausdrucks praktisch 1 ist und damit für diesen Bereich mit dem LO-Approximanden übereinstimmt). Wenn dann trotzdem ein Wert für η bestimmt wird, ist das ein rein mathematisches Ergebnis der Fit-Prozedur ohne Bezug zur dahinterliegenden Physik. Eine Verwendung des FL-Approximi-

manden zur Interpretation von Meßergebnissen wird dadurch erschwert, daß dieser Ausdruck bei kleinen y -Werten eine Singularität (die rein mathematischer Natur ist) besitzt (siehe Fig.5,S.29), die das Problem des richtigen "Abschneidens" des verwendbaren y -Bereichs hervorruft. Weiterhin sind mit η , v , α , C_1 , C_2 und C_3 die Anzahl der Unbekannten in einem Fit zu groß, so daß es praktisch unmöglich ist, diesen Approximanden zu verwenden.

Zusammenfassend läßt es sich sagen, daß es damit bisher nicht möglich war, den kritischen Exponenten η auf einwandfreie Art und Weise experimentell zu bestimmen. Bevor nun die in dieser Arbeit verwendete Methode zur η -Messung genauer dargestellt wird, ist es noch notwendig, Abschätzungen über den Definitionsbereich der Approximanden für 3d-Systeme zu machen, da die Definitionsbereiche in Tabelle 1 nur für das 2d-Ising Modell gelten.

2.3.2 Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ für 3d-Systeme

Im folgenden wird abgeschätzt, ob und wie stark die Gültigkeitsbereiche der Approximanden aus Tab.1, die für das 2d-Ising-Modell exakt gelten, sich für 3d-Systeme verschieben. Die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ kann, ausgehend von Gl.(30),

$$\hat{D}(y) = \frac{1}{1 + y^2 - 4nQ(y^2)y^4} ,$$

für sehr kleine und sehr große y entwickelt werden. Die entsprechenden Koeffizienten für $Q(y^2)$ wurden für 3-dimensionale Systeme von Fisher und Aharony /17/ sowie von Bray /16/ bestimmt.

Die Renormalisierungsgruppen- ϵ -Entwicklung ($\epsilon = 4-d$) für $\hat{D}(y)$ geht aus von der ϵ -Entwicklung des Exponenten η /18/

$$\eta = \frac{(n+2)}{2(n+8)} \epsilon^2 + \frac{(n+2)}{8(n+4)} (-n^2+56n+272) \epsilon^3 + \dots \quad (36)$$

und der ϵ -Entwicklung von $Q(y^2)$

$$Q(y^2) = Q_0(y^2) + Q_1(y^2)\epsilon + Q_2(y^2)\epsilon^2 + \dots \quad (37)$$

Um die Skalenfunktion bis ϵ^2 zu berechnen, muß die Größe $Q_0(y^2)$ /17/ (von der Ordnung ϵ^0) mit dem ersten Term der η -Entwicklung (von der Ordnung ϵ^2) multipliziert werden. Eine Bestimmung von $\hat{D}(y^2)$ bis ϵ^3 bedarf zusätzlich des $Q_1(y^2)$ - Terms /16/ (Ordnung ϵ^1), zusammen mit dem ϵ^2 und ϵ^3 -Term der η -Entwicklung.

Für kleine y lassen sich die $Q_i(y^2)$ als Taylorreihe um $y^2=0$ darstellen:

$$Q_i(y^2) = Q_i(0) + y^2 Q_i'(0) + \frac{y^4}{2} Q_i''(0) + \dots \quad (38)$$

Numerisch wurden $4Q_0(0) = 1.504 \cdot 10^{-2}$ und $4Q_0'(0) = 3.839 \cdot 10^{-4}$ von Fisher und Aharony /17/ bestimmt, während Bray /16/ noch zusätzlich $2Q_0''(0) = 1.628 \cdot 10^{-5}$, $4Q_1(0) = 10^{-5}$, $4Q_1'(0) = 0.458 \cdot 10^{-4}$ und $2Q_1''(0) = 0.402 \cdot 10^{-5}$ berechnete. Diese Konstanten gelten allgemein, unabhängig von der Universalitätsklasse.

Tabelle 2 Entwicklungskoeffizienten Σ_i der Skalenfunktion für kleine y : $D(y)^{-1} = 1 + y^2 - \Sigma_4 y^4 + \Sigma_6 y^6 - \Sigma_8 y^8 + \dots$, berechnet unter Berücksichtigung von Ergebnissen aus /4,16,17/.

Modell Methode	2d-Ising exakt	3d-Ising		3d-Heisenberg	
		ϵ^2	ϵ^3	ϵ^2	ϵ^3
Σ_4	$7.9 \cdot 10^{-3}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	$5.6 \cdot 10^{-4}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$	$5.9 \cdot 10^{-4}$
Σ_6	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$7.1 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$7.9 \cdot 10^{-6}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$
Σ_8	$3.1 \cdot 10^{-7}$	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$6.8 \cdot 10^{-7}$	$3.4 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-7}$

Unter Verwendung dieser Zahlenwerte soll gezeigt werden, daß für kleine y die Skalenfunktion nur sehr wenig von einer Lorentzform $1/(1+y^2)$ abweicht. Das läßt sich besonders gut übersehen, wenn man die Skalenfunktion in der Form

$$\hat{D}(y) = \frac{1}{1 + y^2 - \Sigma_4 y^4 + \Sigma_6 y^6 - \Sigma_8 y^8 + \dots} \quad (39)$$

darstellt. Die Koeffizienten Σ_i lassen sich leicht aus den oben angeführten Q_i 's und der ϵ -Entwicklung von η ausrechnen. In Tabelle 2 sind die Σ_i aufgetragen für das 3d-Ising- und das 3d-Heisenberg-Modell, sowie für das 2d-Ising-Modell, wofür die Koeffizienten von Tracy und McCoy /4/ genau berechnet wurden.

Bevor die für diese Arbeit wichtigen Folgerungen aus dem Ergebnis in Tabelle 2 gezogen werden, soll erst noch das Verhalten der 3d-Skalenfunktion für große y untersucht werden. Entsprechend Gl.(37) wird eine ϵ -Entwicklung von $Q(y^2)$

$$Q(y^2) = Q_0(y^2) + Q_1(y^2)\epsilon + Q_2(y^2)\epsilon^2 + \dots$$

durchgeführt. Für große y wurde der erste Term von Fisher und Aharony /17/ berechnet:

$$Q_0(y^2) = \frac{\ln y}{8y^2} - \frac{Q_{00}}{y^2} + \frac{3(\ln y)^2}{8y^4} - \frac{Q_{01}}{y^4} + \dots$$

mit den Konstanten $Q_{00} = 0.508$ und $Q_{01} = 1.129$. Das zweite Entwicklungsglied berechnete Bray /16/

$$Q_1 = \frac{-Q_{10}}{y^2} + \frac{(\ln y)^3}{16y^4} - \frac{11(\ln y)^2}{y^4} + \frac{\pi^2 \ln y}{16y^4} - \frac{Q_{11}}{y^4}$$

mit den Konstanten $Q_{10} = 0.0268$ und $Q_{11} = -0.52$. Von beiden Autoren /16,17/ wurde in einer länglichen Prozedur (Koeffizientenvergleich der entsprechenden Entwicklungsglieder) gezeigt, daß die obige Entwicklung dem phänomenologisch gefundenen Fisher-Langer-Approximanden, Gl.(35),

$$\hat{D}_{FL}(y) = C_1 y^{-2+\eta} (1 + C_2 y^{(\alpha-1)/\nu} + C_3 y^{-1/\nu} + \dots) ,$$

entspricht und die Koeffizienten C_1 aus den oben berechneten Konstanten Q_{ij} aus den ϵ -Entwicklungen der kritischen Exponenten bestimmt werden können:

$$C_1 = 1 - 4\eta(Q_{00} + \epsilon Q_{01}) + O(\epsilon^4) \quad (40)$$

$$C_2 + C_3 = -1 + 4\eta(Q_{00} - Q_{01} + \epsilon(Q_{10} - Q_{11})) + O(\epsilon^4) \quad (41)$$

$$\alpha C_2 / (C_2 + C_3) = (\gamma - 1) + \frac{1}{4} \pi^2 \eta_0 \epsilon^3 + O(\epsilon^4) . \quad (42)$$

Dabei sind α und γ wie üblich die kritischen Exponenten für spezifische Wärme bzw. Suszeptibilität und η_0 das erste Glied der ϵ -Entwicklung von η (von der Ordnung ϵ^2).

In Tabelle 3 sind die Koeffizienten C_1 , C_2 und C_3 für das 2d-Ising-Modell, sowie 3d-Ising- und 3d-Heisenberg-Modell angegeben, wobei die Ergebnisse teils aus /4,16,17/ übernommen wurden, teils aus Gl.(40-42) unter Verwendung der ϵ -Entwicklung des Exponenten α /18/ bestimmt wurden.

Unter Verwendung der C_1 (Ordnung ϵ^2) aus Tabelle 3 wurde der $\hat{D}_{FL}$ -Approximand berechnet und zusammen mit der exakten Skalenfunktion des 2d-Ising-Modells, $\hat{D}_{FB}(y)$ und $\hat{D}_{LO}(y)$ in Figur 5 skizziert.

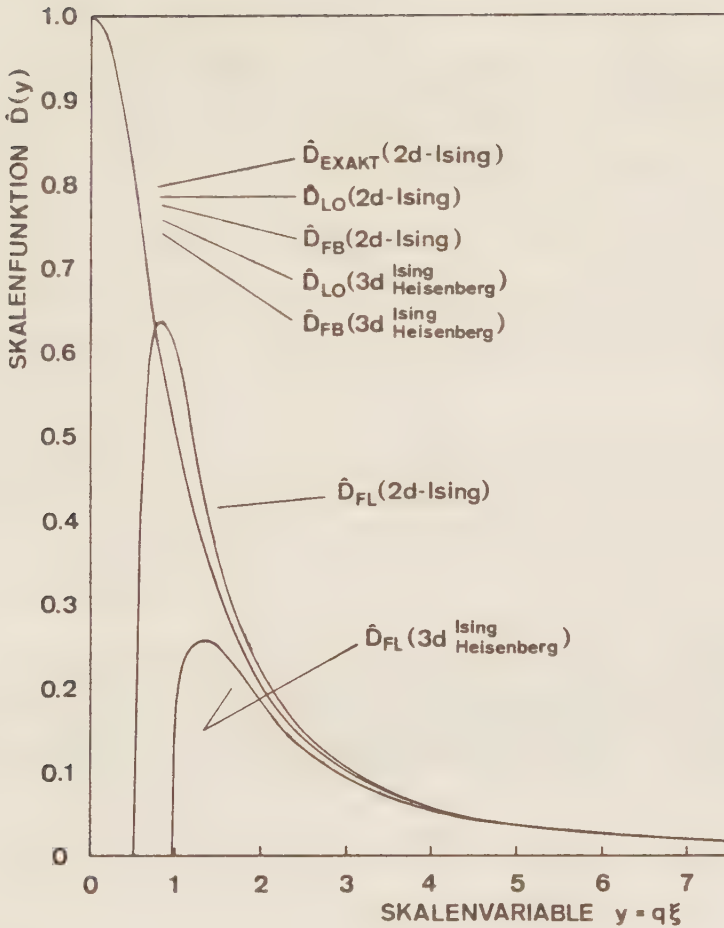


Abb.5 Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ für das 2d-Ising-Modell (punktweise exakt gerechnet), sowie die verschiedenen Approximanden für 2d- und 3d-Systeme. Die Maxima der FL-Approximanden bei $y \neq 0$ sind auf die Singularität des mathematischen Ausdrucks zurückzuführen.

Tabelle 3: Entwicklungskoeffizienten C_i der Skalenfunktion für große y (berechnet unter Verwendung von Ergebnissen aus /4,16,17/)

Modell Methode	2d-Ising exakt	3d-Ising		3d-Heisenberg		Lorentz- Approx.
		ϵ^2	ϵ^3	ϵ^2	ϵ^3	
C_1	0.414	0.962	0.922	0.958	0.919	1
C_2	1.607	3.072	1.103	-3.356	-22.92	0
C_3	0.394	-4.044	-2.006	2.387	22.02	0

Das oben skizzierte Verhalten der Skalenfunktion an den Rändern des Definitionsbereiches (y gegen Null und y sehr groß) sind die einzigen Aussagen, die die Theorie über die Skalenfunktion für 3d-Systeme machen kann⁺⁾ . Sie erlauben aber bereits folgende Schlußfolgerungen für die Gültigkeit der Approximanden, Gl.(32-35), für 3d-Systeme im Vergleich zum 2d-Ising-Modell:

(i) Für kleine y liegen die Ergebnisse für die exakte Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ des 2d-Ising-Modells, $\hat{D}_{FB}(y)$ für 2- und 3-dimensionale Modelle, sowie die Lorentzform $\hat{D}_{LO}(y)$ sehr eng zusammen (Bruchteil der Strichbreite in Fig.5). Aus der Tabelle 2 geht hervor, daß die Koeffizienten ϵ_i für die beiden dreidimensionalen Modelle um fast zwei Größenordnungen kleiner sind als die entsprechenden Koeffizienten des 2d-Ising-Modells. Daraus folgt einerseits, daß die Skalenfunktion im dreidimensionalen Fall wesentlich weniger von einer Lorentzkurve ($\epsilon_4 = \epsilon_6 = \epsilon_8 = 0$) abweicht als im 2d-Ising-Modell, und daß umgekehrt der Gültigkeitsbereich des $\hat{D}_{LO}$ -Approximanden für 3d-Systeme bis zu erheblich höheren y - Werten reicht als beim 2d-Ising-Modell.

⁺⁾ Von Bray /16/ wurde für das 3d-Ising-Modell die Skalenfunktion im Bereich $0 \leq y < 20$ gerechnet, jedoch mit den Exponenten α und η als offenen Parametern.

(ii) Für große y ist der Koeffizient C_1 des führenden Terms mit $C_1(3d\text{-Ising-Heisenberg}) \approx 0.92$ für 3d-Systeme mehr als doppelt so groß als beim 2d-Ising-Modell mit $C_1 = 0.414$ und weicht damit nur mehr wenig vom entsprechenden Koeffizienten $C_1 = 1$ des Lorentz-Approximanden ab. Dreidimensionale Systeme zeigen also auch für große y ein Verhalten, das wesentlich weniger stark von einer Lorentzkurve abweicht als die Skalenfunktion des 2d-Ising-Modells.

(iii) Die Singularität des FL-Approximanden verschiebt sich von $y \approx 0.5$ im 2d-Ising-Fall nach ca. $y \approx 1$ für die 3d-FL-Approximanden (siehe Fig.5). Damit ist anzunehmen, daß auch der y -Bereich, in dem $\hat{D}_{FL}(y)$ gut approximiert, im 3d-Fall erst bei größeren y -Werten beginnt als beim 2d-Ising-Modell. Es soll noch einmal ausdrücklich betont werden, daß die Singularität des FL-Approximanden von mathematischer Natur ist und nichts mit dem Maximum der Korrelationsfunktion (nächstes Kapitel) zu tun hat.

(iv) Entsprechend Gl.(30) ist die Abweichung der Skalenfunktion $\hat{D}(y)$ von der Lorentz-Form durch den Exponenten η gegeben:

$$\hat{D}(y) = \frac{1}{1 + y^2 - 4\eta Q(y^2)y^4} \quad .$$

Der Exponent η wird umso kleiner je größer die Dimension des Systems ist und geht zu Null für $d = 4$, wo dann als Skalenfunktion die Lorentz-Form exakt gilt. Damit ist der Lorentz-Approximand für $d = 3$ ein (noch) besserer Approximand als für $d = 2$ (Ising).

2.4 Bestimmung des Exponenten η aus dem Maximum $y_{\max}$ der Korrelationsfunktion

Bisher wurde die Korrelationsfunktion als "Form" der Streukurve, als Intensität $I(q)$ bei konstanter Temperatur, interpretiert und deren Skalenverhalten dadurch charakterisiert, daß bei geeigneter Normierung (Ordinate bei $q=0$ auf 1 normiert, Abszisse in Einheiten $y=q\xi$) die Streukurven für alle Temperaturen zusammenfallen, nämlich auf die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$. Diese Streukurven $I(q)$ für konstante Temperatur haben natürlich alle ihr Maximum bei $q=0$ bzw. $y=0$ in skalierten Einheiten. Im folgenden soll nun $I(T)$, das Verhalten der Streuintensität als Funktion der Temperatur für konstanten Streuvektor q , untersucht werden. Nach klassischer Theorie (Ornstein-Zernicke /6/ mit $\eta=0$) haben alle diese Kurven $I(T)$ ihr Maximum an der Curietemperatur T_c . Eine genauere theoretische Betrachtung /12/ ergibt jedoch, daß als Folge von $\eta \neq 0$ das Maximum nur für die Vorwärtsstreuung ($q=0$) bei T_c auftritt, aber für wachsenden Streuvektor q zu höheren Temperaturen $T_{\max}(q) > T_c(q=0)$ wandert (Fig.6).

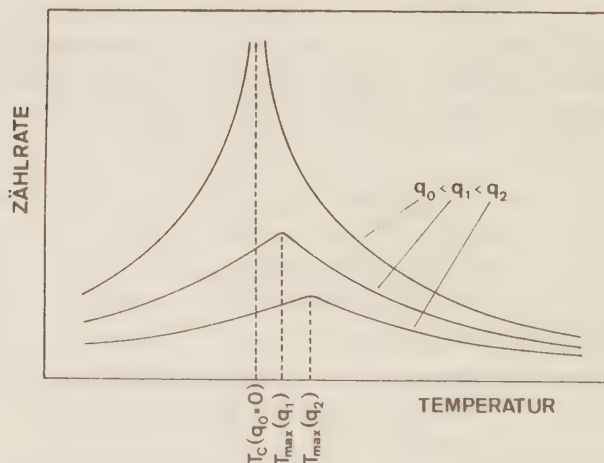


Abb.6 Streuintensität $I(T)$ als Funktion der Temperatur für konstanten Streuvektor q .

Formal bestimmt sich die Position des Maximums aus der Differentiation der Korrelationsfunktion $\hat{G}(y)$, aus Gl.(29), nach y bei konstant gehaltenem Streuvektor q .

$$\frac{d}{dy} \left(y^{2-\eta} \hat{D}(y) \right) = 0 . \quad (43)$$

Der Zusammenhang zwischen dem als Lösung von Gl.(43) gefundenen Extremum (Maximum) $y_{\max}$ in skalierten Einheiten und der experimentell beobachtbaren Temperatur $T_{\max}(q)$ des Streumaximums als Funktion des Streuvektors folgt aus der Definition $y = q\xi$ und dem Potenzgesetz $\xi = \xi_0 ((T - T_C)/T_C)^{-\nu}$:

$$y_{\max} = q\xi_0 \left(\frac{T_{\max}(q) - T_C}{T_C} \right)^{-\nu} . \quad (44)$$

Eine simple algebraische Umformung liefert

$$\begin{aligned} T_{\max}(q) &= T_C + y_{\max}^{-1/\nu} \xi_0^{1/\nu} T_C q^{1/\nu} \\ &= T_C + m q^{1/\nu} , \end{aligned} \quad (45)$$

wobei die Größe m als experimentell bestimmbare Steigung der Funktion $T_{\max}(q)$ über $q^{1/\nu}$ definiert ist. Damit läßt sich die skalierte Größe $y_{\max}$ aus den experimentell zugänglichen Größen m , T_C , ξ_0 und ν berechnen:

$$y_{\max} = m^{-\nu} \xi_0 T_C^{\nu} . \quad (46)$$

Durch Einsetzen der verschiedenen Approximanden für $D(y)$ in Gl.(43) ergibt sich die Beziehung zwischen dem Maximum $y_{\max}$ und dem Exponent η und teilweise weiteren Größen, die die Korrelationsfunktion bestimmen.

Lorentz-Approximation

$$\hat{D}_{LO} = 1/(1 + y^2)$$

$$y_{\max}^{LO} = \sqrt{\frac{2-\eta}{\eta}} \quad (47)$$

Fisher- Burford-Approximand

$$\hat{D}_{FB} = (1 + \phi^2 y^2)^{\eta/2} / (1 + y^2)$$

$$y_{\max}^{FB} = \sqrt{\frac{2-\eta}{\eta - 2\phi^2}} \quad (48)$$

Fisher-Langer-Approximand (d=2)

$$\hat{D}_{FL}^{2d} = C_1 y^{-2+\eta} (1 + y^{-1/\nu} (C_2 \ln y + C_3))$$

$$y_{\max}^{2d-FL} = \exp\left(\frac{C_2 - C_3}{C_2}\right) \quad (49)$$

Fisher-Langer-Approximand (d=3)

$$\hat{D}_{FL}^{3d} = C_1 y^{-2+\eta} (1 + y^{-1/\nu} (C_2 y^{\alpha/\nu} + C_3))$$

$$y_{\max}^{3d-FL} = \left(\frac{C_3}{C_2(\alpha-1)}\right)^{\nu/\alpha} \quad (50)$$

Dabei sind in Gl. (49, 50) die Größen C_2 und C_3 Funktionen von η , siehe Gl. (41, 42).

Zur Diskussion der physikalischen Gültigkeit der formal mathematischen Ergebnisse Gl. (47-50) für $y_{\max}$, und damit der Frage, welche der Gleichungen man zur Bestimmung von η verwenden soll, hat man so zu verfahren, wie zuvor beim Definitionsbereich der Approximanden. Das wahre Maximum $y_{\max}$ der Korrelationsfunktion, das die Physik richtig wiedergibt, ist zwangsläufig der Ausdruck, dessen zugehöriger Approximand im Bereich des Maximums am besten die wahre Korrelations- bzw. Skalenfunktion wiedergibt. Als "Test" dafür bietet sich wieder das 2d-Ising-Modell an, bei dem die Korrelationsfunktion für jedes y numerisch genau bestimmt werden kann /4/, und damit natürlich auch das Maximum $y_{\max}$ (2d-Ising) der Korrelationsfunktion. Der genaue Zahlenwert /19/ beträgt

$$y_{\max}^{\text{exakt}}(2d\text{-Ising}) = 2.7078 \quad \hat{G}(y_{\max}^{\text{ex}}(2d\text{-Ising})) = 1.790 \quad (51)$$

Andererseits sind für das 2d-Ising-Modell auch die Zahlenwerte aller in den Formeln für $y_{\max}^{LO}$, $y_{\max}^{FB}$ und $y_{\max}^{FL}$ vorkommenden Konstanten exakt oder numerisch bekannt /4/ ($\eta=0.25$, $\phi=0.0294...$, $C_2=1.606...$, $C_3=0.395...$). Eingesetzt ergeben sich für die Koordinaten des Maximums, je nach Approximand, die folgenden Werte:

$$y_{\max}^{\text{LO}}(2\text{d-Ising}) = 2.646 \quad \hat{G}(y_{\max}^{\text{LO}}(2\text{d-Ising})) = 1.781 \quad (52)$$

$$y_{\max}^{\text{FB}}(2\text{d-Ising}) = 2.655 \quad \hat{G}(y_{\max}^{\text{FB}}(2\text{d-Ising})) = 1.782 \quad (53)$$

$$y_{\max}^{\text{FL}}(2\text{d-Ising}) = 2.126 \quad \hat{G}(y_{\max}^{\text{FL}}(2\text{d-Ising})) = 1.887 \quad (54)$$

Diese Zahlenwerte für $y_{\max}$ und $\hat{G}(y_{\max})$ zeigen im Vergleich zu den exakt gerechneten Werten Gl. (51) des 2d-Ising-Modells, daß das Maximum am besten vom einfachen Lorentz- bzw. vom FB-Approximanden repräsentiert wird. Das deckt sich mit dem Ergebnis über die Gültigkeitsbereiche der Approximanden in Kap. 2.3.1. Mit $y_{\max}^{\text{ex}} = 2.708$ liegt das exakt gerechnete Maximum im Gültigkeitsbereich des LO- und FB-Approximanden (Genauigkeit 1% im Bereich $0 < y < 4$), während der FL-Approximand, der ja als Näherung für große y konzipiert ist, in diesem Bereich ziemlich schlecht wird.

In Abb. 7 und 8 ist die Korrelationsfunktion für das 2d-Ising-Modell im Bereich des Maximums graphisch dargestellt. Als Abszisse ist, analog zum experimentellen Fall, die Temperatur bzw. die Temperaturdifferenz zu T_c , anstelle der skalierten Größe y angegeben. Die Beziehung ergibt sich aus der Definitionsgleichung $y = q\xi_0((T-T_c)/T_c)^{-\nu}$.

$$\begin{aligned} (T-T_c) &= (q\xi_0)^{1/\nu} T_c y^{-1/\nu} \\ &= \text{const. } y^{-1/\nu} . \end{aligned} \quad (55)$$

Die nicht-universellen Größen ξ_0 und T_c wurden im Programm auf $\xi_0 = 1\text{\AA}$ und $T_c = 30\text{ K}$ festgelegt, so daß die Maximumverschiebung des 2d-Ising-Modells zahlenmäßig etwa unserem Experiment entspricht. Für den Streuvektor wurde mit $\vec{q} = 9.0 \cdot 10^{-3}\text{ \AA}^{-1}$ ein Wert circa in der Mitte des experimentellen Meßbereichs ausgewählt.

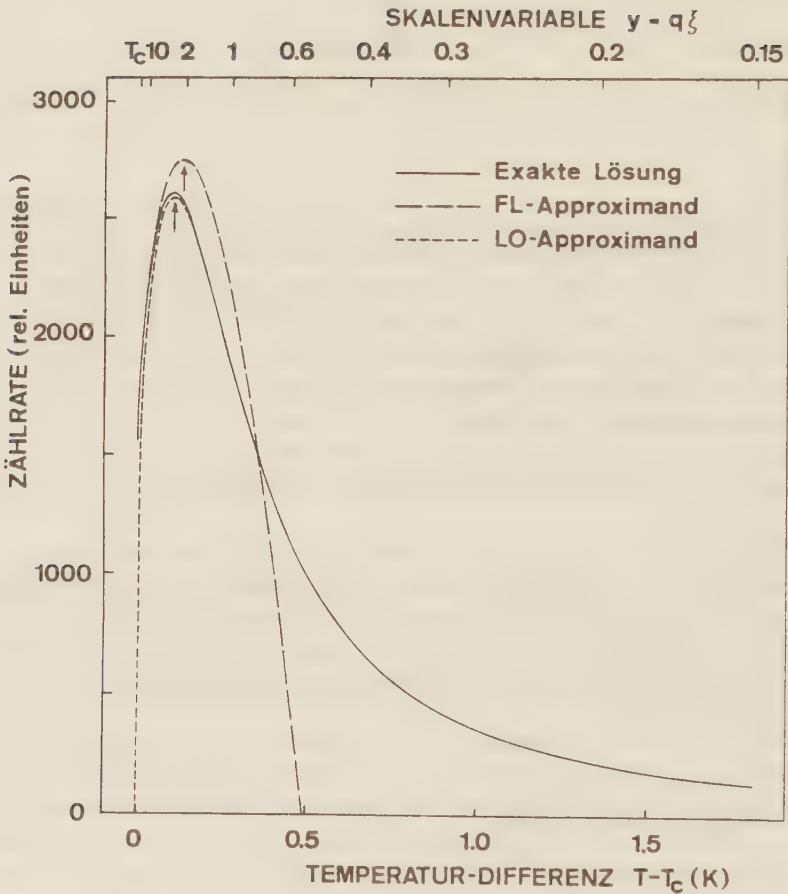


Abb. 7 Computer-Experiment am 2d-Ising-Modell für die Streuintensität $I(T)$, bzw. die Korrelationsfunktion, als Funktion der Temperatur. Die Abszisse verläuft linear auf der unteren Skala in Einheiten von $(T - T_c)$ und nicht linear sowie von rechts nach links auf der oberen Skala in Einheiten von y (siehe Gl.(55)). Die Einheit der Ordinate ist willkürlich gewählt. Die Rechnungen wurden für einen Streuvektor $q = 9.0 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ durchgeführt.

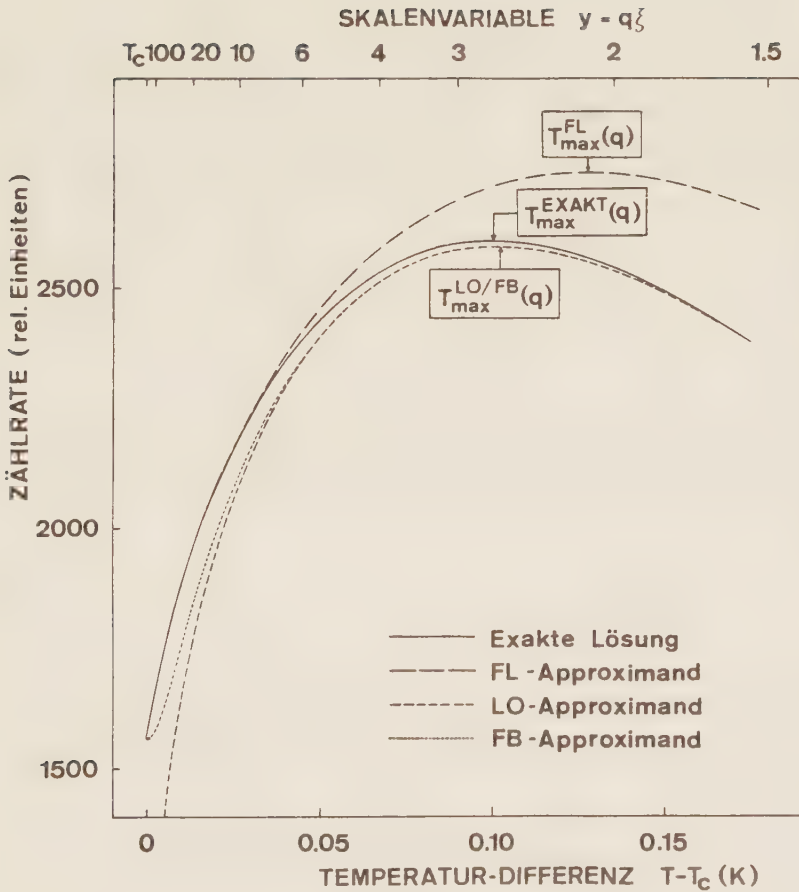


Abb.8 Ausschnitt aus Abb.7 mit Vergrößerung der Abszisse um einen Faktor 10 und der Ordinate um einen Faktor 2. Die Maxima der Streufunktion bzw. der Approximanden sind mit einem Pfeil markiert.

Aus den Abb. 7 und 8 wird ersichtlich, daß von hohen Temperaturen oberhalb T_C kommend, die exakte Korrelationsfunktion (nach den numerischen Ergebnissen in /4/) ausgezeichnet vom LO-Approximand dargestellt wird, ebenso das Maximum selbst und erst im Bereich links von Maximum ($T_C < T < T_{\max}(q)$) der LO-Approximand versagt. Der FB-Approximand ist weitestgehendst mit der LO-Kurve identisch, mit der Verbesserung, daß er direkt bei T_C den Wert der Korrelationsfunktion richtig wiedergibt. Dagegen reproduziert der FL-Approximand als "large-y"-Approximand den Bereich nahe T_C ausgezeichnet, während das Maximum bereits zu weit rechts und mit deutlich zu großem Ordinatenwert erscheint. Rechts vom Maximum, also für kleine y , hat der FL-Approximand die schon in Kap. 2.3.2 erwähnte Singularität, die ihn in diesem Bereich unbrauchbar werden läßt.

Für die experimentelle Bestimmung von η aus dem Maximum der Streuintensität bedeutet dies, daß der Zusammenhang zwischen $y_{\max}$ und η durch Gl.(47) am besten wiedergegeben wird. Die Gleichung (47), aufgelöst nach η , ergibt

$$\eta = \frac{2}{y_{\max}^2 + 1} \quad (56)$$

Bei Einsetzen des exakten 2d-Ising Wertes für $y_{\max}$ aus Gl.(51) ergibt sich ein η von 0.24003... und damit im 2d-Ising-Fall ein Fehler von 4%.

Die skalierte Größe $y_{\max}$ ist, entsprechend Gl.(46) aus den experimentell zugänglichen Größen $T_{\max}(q)$ bzw. experimenteller Steigung m , T_C , ξ_0 und v zu bestimmen. Einsetzen von Gl.(46) in Gl.(56) ergibt die Endformel für die experimentelle Bestimmung von η aus der Verschiebung des Temperaturmaximums der Streuintensität $T_{\max}(q)$ mit wachsendem Streuvektor q :

$$\eta = \frac{2}{m^{-2v} \xi_0^2 T_C^{2v} + 1} \quad (57)$$

Bevor Gl.(57) im experimentellen Teil der Arbeit zur Auswertung des Exponenten η aus Neutronenstreudaten an Nickel verwendet wird, sei noch auf die Schlußfolgerungen am Ende von Kap. 2.3.2 verwiesen, aus denen hervorgeht, daß die Formel Gl.(57) zur Bestimmung von η , die unter Zuhilfenahme des exakt lösbaren 2d-Ising-Modells abgeleitet wurde, auch auf 3d-Systeme zu verallgemeinern ist. Der Lorentz-Approximand, in dessen Gültigkeitsbereich das skalierte Maximum $y_{\max}$ liegt, approximiert entsprechend Kap. 2.3.2 für 3d-Systeme besser und sein Gültigkeitsbereich reicht zu höheren y -Werten als im 2d-Ising-Modell.

3. Durchführung der Experimente

Bereits in den Jahren nach 1967, als Fisher und Burford /12/ die Maximumverschiebung der kritischen Streuung erstmals theoretisch vorausgesagt hatten, wurden große Anstrengungen unternommen, diese auch experimentell an Ferromagneten /21-24/ bzw. am strukturellen Phasenübergang von β -Messing /25/ nachzuweisen. Es ergab sich jedoch auf Grund großer statistischer Fehler (geringer Neutronenfluß) und anderer experimenteller Unzulänglichkeiten (geringe Anzahl von Meßpunkten; teilweise 2 Maxima statt einem erkennbar; Ergebnis abhängig von der Qualität der Probe; Temperaturen weit oberhalb T_C und damit außerhalb des "kritischen Bereichs" $(T-T_C)/T_C < 10^{-2}$) allenfalls ein qualitativer Nachweis der Maxima oberhalb T_C . Dann wurde etwas später von Als-Nielsen /26/ gezeigt, daß für die relativ großen Streuwinkel bzw. Streuvektoren $\vec{q}$ dieser Experimente starke Korrekturen der inelastischen Streuanteile notwendig wären, die die Meßergebnisse zusätzlich in Frage stellten. Damit wurde die ganze Problematik für viele Jahre als jenseits der experimentellen Möglichkeiten abgetan. Erst in dieser Arbeit wurde das Thema der Maximumverschiebung wiederaufgegriffen auf Grund der Möglichkeit, daraus den Exponenten η zu bestimmen. Eine η -Bestimmung aus der Maximumverschiebung erfordert jedoch nicht nur eine qualitative, sondern eine genaue quantitative Bestimmung von $T_{\max}(q)$. Dieses Ziel ist nur mit Hilfe einer immensen Verbesserung der experimentellen Möglichkeiten im Vergleich zu den früheren Versuchen (aus den Jahren um 1970) erreichbar:

- (i) Der verfügbare Neutronenfluß am Höchstflußreaktor ILL in Grenoble ist um einen Faktor 10^2 bis 10^3 größer als bei den damaligen Experimenten.
- (ii) Das Kleinwinkel-Diffraktometer D11 am ILL ist für erheblich kleinere q -Werte (Faktor 10^{-2} bis 10^{-3}) zugänglich als bei den früheren Experimenten. Mit Hilfe eines Multidetektors ist eine simultane Messung bei ca. 30 verschiedenen $\vec{q}$ -Werten möglich.
- (iii) Mit einer aufwendigen Ofenkonstruktion konnte die Proben-temperatur auf besser als 10^{-2} K geregelt und auf Tage hinaus stabilisiert werden. Damit konnte eine große Anzahl von Meß-temperaturen in einem engen Bereich um T_C realisiert werden.

3.1 Neutronenstreudiffraktometer D11

Die Neutronenexperimente wurden am Kleinwinkelstreudiffraktometer D11 des Instituts Laue-Langevin in Grenoble durchgeführt. Die Abbildungen 9 und 10 zeigen in schematischer Darstellung das Instrument /27/. Es befindet sich am Ende des Neutronenleiters H15, wobei die Probenposition etwa 60 Meter vom Reaktorcore entfernt ist. Die Neutronenleiter dienen einerseits dazu, eine **günstige** Position der Instrumente in einem größeren Abstand von der Reaktorabschirmung zu ermöglichen, wo mehr Platz ist, andererseits wird durch eine leichte Krümmung ($r = 2800 \text{ m}$) der Neutronenleiter der Untergrund an γ -Strahlung extrem verringert. An der Reaktorseite ist der Neutronenleiter H15 auf die kalte Quelle gerichtet. Die kalte Quelle (flüssiges D_2O in einem Behälter mit $38 \text{ cm } \varnothing$ und 20 cm Höhe) moderiert die thermischen Neutronen (Maxwell-Verteilung mit Maximum $\sim 1 \text{ \AA}$ Wellenlänge der Neutronen) auf kalte Neutronen (Maxwellverteilung mit etwa $6 \text{ \AA}$ Maximum). Dieser "weiße" Strahl mit einem Fluß von $\text{ca } 5 \cdot 10^8 \text{ neutronen/sec/cm}^2$ wird am D11 durch einen mechanischen Geschwindigkeitsselektor auf Wellenlängen zwischen 2 und $20 \text{ \AA}$ ($6.65 \text{ \AA}$ in unserem Experiment) mit 9% Halbwertsbreite (FWHM) monochromatisiert. Die Kollimationsstrecke ist durch herausnehmbare Abschnitte des Neutronenleiters auf $40, 20, 10, 5$ bzw. 2 Meter einstellbar (10 m in unserem Experiment). An der Probenposition wurde eine Streukammer eingesetzt, die an der Universität München speziell für diese Experimente konstruiert wurde (siehe Kap. 3.2). Die gesamte Flugstrecke der Neutronen vom Reaktor über die Probe bis zum Detektor ist evakuiert. Der BF_3 -Detektor ist auf Positionen von $2.5, 5.5, 10.5, 20.5$ und 40.5 m hinter der Probe (10.5 m für dieses Experiment) verschiebbar. Es handelt sich um einen flächensensitiven Multidetektor von 4096 Zellen der Größe 1 cm^2 in einer 64×64 Matrix.

Die Steuerung und Kontrolle des Instruments erfolgt mit einem DEC-PDP-11 Computer direkt am D11. Der Verlauf des Experiments und einfache Auswerteprogramme können mittels dieses Instrument-Computers on-line am Bildschirm verfolgt bzw. ausgedruckt werden. Die Daten werden dann automatisch für jede abgeschlossene Messung geordnet und zusammen mit den experimentellen Parametern an eine

Großrechenanlage DEC - PDP 10 übertragen. An dieser Rechenanlage fand dann die endgültige Auswertung der Daten statt. Ein Teil der eigens für die Auswertung geschriebenen Fortran-Programme ist als Anhang dieser Arbeit angefügt.

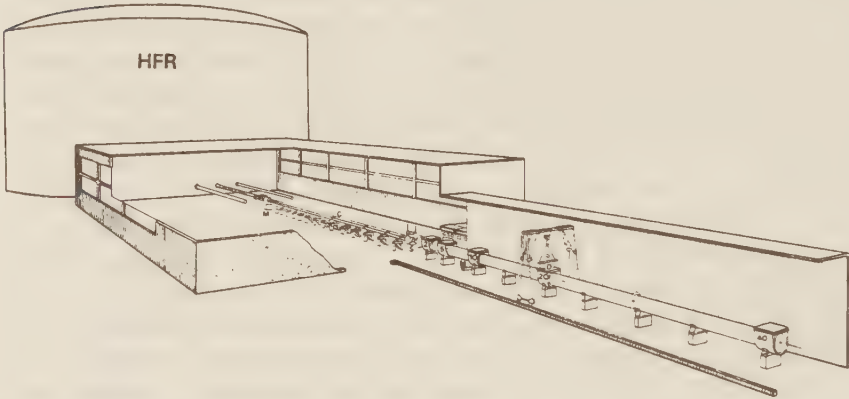


Abb.9 Perspektivische Darstellung des Kleinwinkelstreuinstrumentes D11 in der Neutronenleiterhalle des ILL. Alle weiteren in der Halle befindlichen (ca. 35) Instrumente sind der besseren Übersicht wegen weggelassen. Bezeichnungen: Hochflußreaktor (HFR), mechanischer Geschwindigkeitsselektor (M), ausfahrbare Neutronenleiter in der Kollimationsstrecke der Neutronen (C), Streukammer mit Probe (S), Detektor (D). Nach /27/.

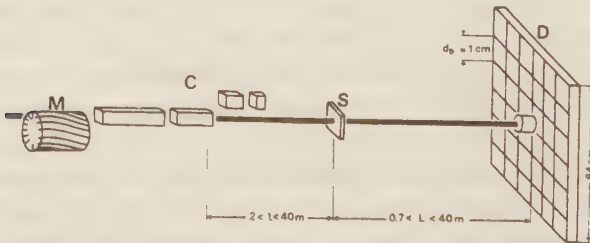


Abb.10 Schematische Darstellung des Instruments D11. Bezeichnungen wie Abb.9, sowie Kollimationstrecke der Neutronen (l) und Abstand des Detektors von der Probe (L). Nach /27/.

3.1.1 Radiale Zusammenfassung der Detektorelemente bei isotroper Streufigur

Die Anordnung eines Multidetektors am D11 mit 4096 Zellen auf $64 \times 64 \text{ cm}^2$ dient in erster Linie dazu, anisotrope Streuprozesse zu untersuchen. Für isotrope Streuung bietet er jedoch die einmalige Möglichkeit die Streuintensität für einen bestimmten Betrag des Streuvektors $|\vec{q}|$ nicht mit einem einzigen Zählrohr zu messen, sondern am Multidetektor alle Detektorzellen zusammenzufassen, die auf einem Kreisring mit dem Radius $|\vec{q}|$ liegen. Der Vorteil wiegt doppelt: Einmal vergrößert sich natürlich die Zählrate bzw. reduziert sich die Meßzeit durch simultanes Zählen auf einem Kreisring, andererseits verkleinert sich der statistische Fehler um einen Faktor $1/\sqrt{N}$, wenn N die Anzahl der Zellen ist, über die gemittelt wird. Praktisch geht man so vor, daß man konzentrische Kreisringe mit 1 cm Breite wählt, entsprechend der Größe der Detektorzellen mit 1 cm^2 , und alle Detektorzellen aufsummiert, deren Mittelpunkt auf der Fläche des betreffenden Kreisringes liegt. Diese Prozedur wird "softwaremäßig" bei der Datenauswertung durchgeführt. Dazu wurde an der PDP 10 ein Programm AN10 verwendet, das eine leichte Modifikation des ILL-Standardprogramms SNILS /28/ darstellt. Dieses Programm überprüft und eliminiert zusätzlich "schlechte" Zellen von der Auswertung, wenn diese deutlich vom Mittelwert der benachbarten Zellen abweichen. Zugleich wird der Mittelwert $|\vec{q}|$ für alle im Kreisring befindlichen Zellen berechnet. Eine verkürzte Version dieses Programms (WU1) ist im Anhang abgedruckt. Voraussetzung für diese Form der Datenanalyse ist natürlich, daß die erhaltene Streufigur auch tatsächlich radialsymmetrisch ist. Dies muß für jede Versuchsreihe überprüft werden. Die Abbildung 11 zeigt einen Konturplot für eine typische Messung bei einer Temperatur von 629.31 K , das entspricht einer reduzierten Temperatur $\tau = 1.3 \cdot 10^{-4}$. Der Konturplot projiziert die dreidimensionale Funktion $I(\vec{q})$, Zählrate über der Detektorfläche, mit Schnitten für jeweils konstante Zählrate auf die Zeichenebene. Ein isotropes Streuverhalten wird durch konzentrische Kreise der Konturlinien charakterisiert, was nach Abb.11 für unseren Versuch gut erfüllt ist. Das Rechteck in der Mitte der Fig.11 ist eine Projektion des "Beam-Stops", eines Cadmiumblechs, das den Primärstrahl, d.h. die ohne Wechsel-

wirkung durch die Probe fliegenden Neutronen, absorbiert. Der Primärstrahl muß abgedeckt werden, weil er sonst auf Grund der hohen Zählrate den Detektor zerstören würde.

6546

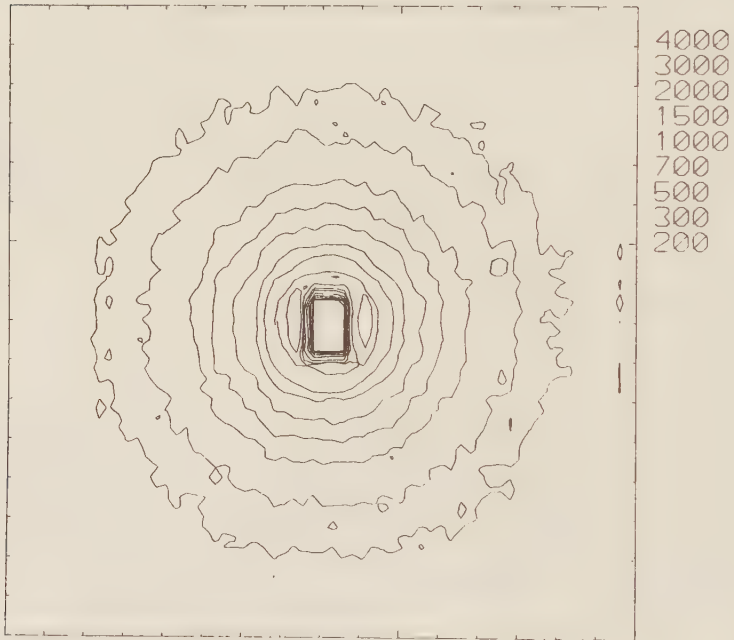


Abb.11 Konturplot für eine Messung der kritischen Streuung bei einer Temperatur von 629.31 K . Die Figur stellt die Detektorfläche dar, wobei jeweils Zellen mit gleicher Zählrate durch eine Linie miteinander verbunden sind. Die Zahlen rechts geben die konstanten Zählraten in Counts per Monitor für die einzelnen Linien an, wobei die niederste Zählrate (200) der äußersten Linie entspricht. Das Rechteck in der Mitte der Abbildung mit der Zählrate Null ist der durch den "Beamstop" abgedeckte Bereich des Detektors.

3.1.2 Inelastische Integration am Zweiachsen-Diffraktometer

Bei jeder Messung eines nicht völlig elastischen Streuvorgangs mit einem Kleinwinkelstreuinstrument, oder allgemein mit einem Zweiachseninstrument, muß die Gültigkeit der quasielastischen Näherung für das Experiment überprüft werden. Diese sagt, daß die Integration eines Streuvorgangs über alle Energiezustände bei konstantem Streuvektor sich wie der statische Anteil des Streugesetzes verhält,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\hbar\omega F(q, \hbar\omega) \chi(q) \longrightarrow \chi(q) \quad (58)$$

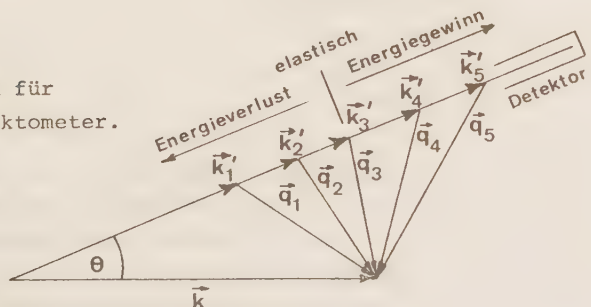
mit elastischem (statischem) Anteil $\chi(q)$ und nicht-elastischem (dynamischem) Anteil $F(q, \hbar\omega)$ der Streufunktion. Tatsächlich findet aber die Integration über die Energiezustände der gestreuten Neutronen beim Zweiachsen-Diffraktometer (prinzipieller Aufbau von Zwei- und Dreiachsen-Instrument in Abb.13 und 14) nicht bei genau konstantem Streuvektor statt, wie es die quasielastische Näherung vorsieht. Aus dem Streudiagramm (Abb.12) ergibt sich, daß am Zweiachsen-Instrument der Streuvektor $\vec{q}$ eine Funktion des Energieübertrags $\pm\hbar\omega$ ist.

$$|\vec{q}| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2|\vec{k}||\vec{k}'|\cos\theta} \quad (59)$$

oder

$$|\vec{q}(\hbar\omega)| = q(\hbar\omega) = \sqrt{\frac{8\pi^2}{\lambda^2} - \frac{2m\omega}{\hbar} - \frac{4\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{4\pi^2}{\lambda^2} - \frac{2m\omega}{\hbar}} \cos\theta} \quad (60)$$

Abb.12 Streudiagramm für ein Zweiachsen-Diffraktometer.



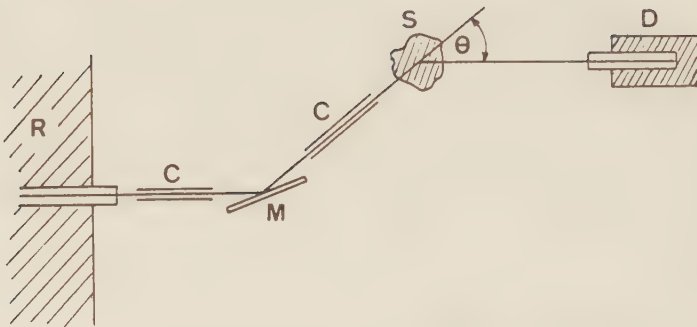


Abb.13 Schematische Darstellung eines Zweiachsen-Diffraktometers. Ein "weißer" Neutronenstrahl aus dem Reaktor (R) wird nach Kollimation (C) und Monochromatisierung (M) an der Probe (S) unter einem Winkel θ in den Detektor (D) gestreut. Der Detektor summiert alle Neutronen in der Flugrichtung des Winkels θ für beliebige Energie der Neutronen und damit einem von der Energie abhängigen Streuvektor $\vec{q}(\hbar\omega)$. Bei Kleinwinkel-Instrumenten wird häufig ein mechanischer Geschwindigkeitsselektor an Stelle des Monochromatorkristalls verwendet.

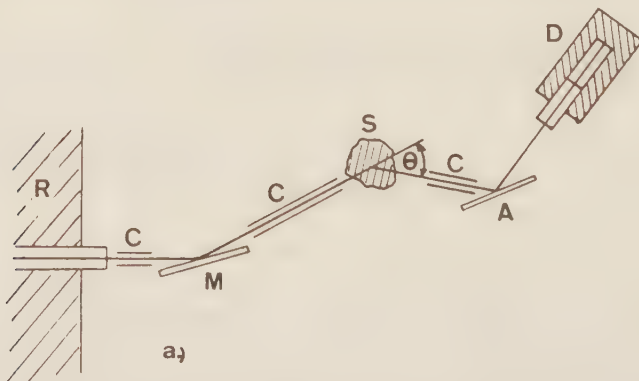


Abb.14 Schematische Darstellung eines Dreiachsen-Instruments. Beschreibung wie Abb.13, jedoch fallen die von der Probe gestreuten Neutronen erst auf einen Analysatorkristall (A), der Neutronen für eine bestimmte Energie und damit für einen festen Streuvektor $\vec{q}$ in Richtung des Detektors reflektiert.

Um das tatsächliche $q(\hbar\omega)$ des Experiments zu erhalten, muß die "Dispersionsbeziehung", Gl.(60), noch mit der Wellenlängenverteilung des ankommenden Neutronenstrahls gefaltet werden. Der mechanische Geschwindigkeitsselektor am Instrument D11 liefert eine Wellenlängenverteilung mit einem Dreiecksprofil (Halbwertsbreite (FWHM) 9% der nominell eingestellten Wellenlänge λ_0 /27/):

$$q_{\text{FALT}}(\hbar\omega) = \int_{\lambda_0 - \text{FWHM}}^{\lambda_0 + \text{FWHM}} d\lambda (\text{FWHM}^{-1} - |\lambda - \lambda_0| \text{FWHM}^{-2}) q(\hbar\omega) \quad (61)$$

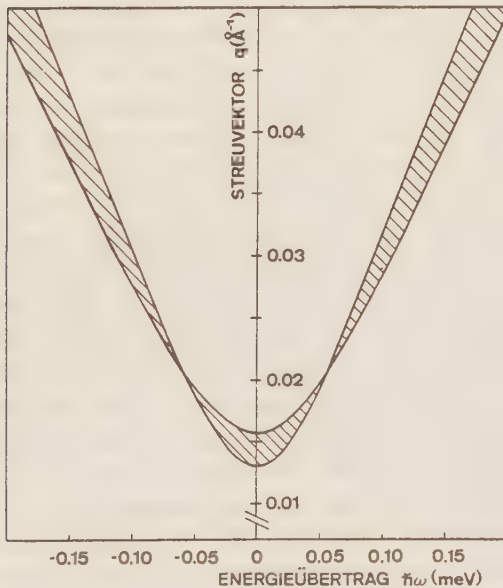


Abb.15 "Dispersionsbeziehung" zwischen Energieübertrag $\hbar\omega$ (Inelastizität der Streuung) und Streuvektor q am Instrument D11. Die experimentellen Parameter sind für den Streuwinkel $\theta=0.86$ Grad und für die Wellenlänge $\lambda_0=6.65 \text{ \AA} \pm 9\%$, was einem elastischen Streuvektor $q_{\text{el}}=1.42 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1} \pm 9\%$ entspricht. Die beiden Begrenzungslinien der Schraffierung gelten für die Wellenlängen 6.05 und 7.25 $\text{\AA}$, den beiden Sockelpunkten der Dreiecksverteilung $6.65 \pm 9\% \text{ \AA}$. Die Schnittpunkte beider Kurven werden zu einem Band verschmiert, wenn noch weitere "Dispersionskurven" für $6.05 \leq \lambda \leq 7.25 \text{ \AA}$ eingezeichnet werden.

Die Abbildung 15 gibt diese gefaltete "Dispersionsbeziehung", entsprechend Gl.(60,61), für einen Streuwinkel $\theta=0.86$ Grad (im Experiment verwendeter mittlerer Streuwinkel) wieder. Die Wellenlängenverteilung ist charakterisiert durch die Schraffierung, wobei die Begrenzungslinien der Schraffierung für die beiden Wellenlängen am Fuß der Dreiecksverteilung, also $6.65 \text{ \AA} \pm 9\%$, gerechnet wurden. Der physikalische Inhalt der Abb.15 läßt sich sehr anschaulich beschreiben: Bei einer am Selektor eingestellten Wellenlänge $\lambda = 6.65 \text{ \AA}$ zählt ein Detektorelement in Richtung des Streuwinkels $\theta = 0.86$ Grad alle Neutronen, deren Energie und Impuls im schraffierten $\hbar\omega - q$ -Bereich liegen.

Das bisher Gesagte folgt aus dem geometrischen Aufbau des Instruments und gibt an, in welchem $\hbar\omega - q$ - Bereich bei einer bestimmten Detektorposition Neutronen gezählt werden könnten. In welchem $\hbar\omega - q$ -Bereich jedoch tatsächlich gestreute Neutronen vorhanden sind, hängt ausschließlich vom Streugesetz und damit von der untersuchten Probe ab. Um zu entscheiden, ob die inelastische Integration bei nicht-konstantem q eines Zweikreisinstruments eine Messung verfälscht und Korrekturen notwendig macht, muß ein quasielastisches Streugesetz entlang dem Weg $q(\hbar\omega)$ der Dispersionsgleichung, (Gl.(60)), über $\hbar\omega$ integriert werden /26/ und dann über die Wellenlängenverteilung der einfallenden Neutronen gefaltet werden. Für die kritische Streuung am Phasenübergang wird der quasielastische Streuanteil durch eine Spektralfunktion $F(q, \hbar\omega)$ dargestellt (Gl.(22)), deren Abhängigkeit von Energieübertrag $\hbar\omega$, Streuvektor $|\vec{q}|$ und insbesondere reduzierter Temperatur $\tau = (T-T_C)/T_C$ in der dynamischen Skalentheorie /29-32/ theoretisch untersucht wurde und experimentell an Ferromagneten /42/ gut bestätigt wurde. Von Halperin und Hohenberg /29/ wurde neben der üblichen Normierung,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F(q, \hbar\omega) = 1 \quad , \quad (62)$$

das Konzept einer charakteristischen Frequenz $\omega_C(q)$ mit

$$\int_{-\omega_C(q)}^{+\omega_C(q)} d\omega F(q, \hbar\omega) = \frac{1}{2} \quad (63)$$

und der Eigenschaft eingeführt, daß $\omega_c(q)$ eine homogene Funktion von Streuvektor q und Korrelationslänge ξ (und damit von τ) ist:

$$\omega_c(q) = c q^{5/2} \Omega(q\xi) \quad (64)$$

Dabei ist $\Omega(y)$ die sogenannte dynamische Skalenfunktion, die eine Funktion von nur einer Variablen $y = q\xi$ ist (entsprechend der statischen Skalenfunktion $D(y)$ in Gl.(30)), und c ist eine material-spezifische Konstante. Die dynamische Skalenfunktion $\Omega(y)$ wurde von Résibois und Piette /30/ für Ferro- und Antiferromagneten numerisch punktweise gerechnet und in tabellierter Form /31/ angegeben. Mit guter Genauigkeit (Fehler kleiner 1%) läßt sich $\Omega(y)$ durch den folgenden Ausdruck darstellen:

$$\Omega(y) = \begin{cases} 0.587 - 0.355(y - 1.052)^3 & \text{für } y \leq 1.052 \\ 0.424 y + 0.636 e^{-1.36y} & \text{für } y > 1.052 \end{cases} \quad (65)$$

Die Kenntnis der charakteristischen Frequenz $\omega_c(q)$ läßt jedoch immer noch die funktionale Form der Spektralverteilung $F(q, \hbar\omega)$ offen. Diese wurde von Hubbard /32/ berechnet, und zwar als Gaußfunktion für einen Ferromagneten im kritischen Temperaturbereich. Außerhalb des kritischen Bereichs geht die Spektralverteilung langsam von der Gaußkurve in die Lorentzfunktion der hydrodynamischen Theorie über, die weit weg von T_c gilt.

Damit läßt sich aus der dynamischen Skalentheorie und nur einer experimentellen Konstanten ($c = 330 \text{ meV } \text{\AA}^{5/2}$ /39/ für Nickel in Gl.(64)) die dynamische Skalenfunktion $F(q, \hbar\omega)$ für beliebige Werte berechnen. Die Abbildung 16 gibt die Ergebnisse dieser Rechnungen in pseudo-dreidimensionaler Darstellung wieder: Die Spektralfunktion $F(q, \hbar\omega)$ ist als Gebirge über der "Parabel" aus Abb.15 aufgetragen, die den inelastischen Meßbereich für einen festen Streuwinkel charakterisiert. Das erlaubt nun eine graphische Interpretation der Integration des Zweiachsen-Instruments für die Physik unseres Experiments: Von jeder $F(q=\text{const}, \hbar\omega)$ - Verteilung kann nur der Anteil der Intensität am Detektor gezählt werden, der oberhalb der schraffierten q - $\hbar\omega$ -Fläche steht (schwarze Flächen bzw. Balken in Abb.16). Im Bereich des Scheitels

der "Parabel" der Dispersionskurve ist $F(q, \hbar\omega)$ eine so schmale Verteilungsfunktion (Breite $\sim q^{5/2}$, Gl.(64)), daß praktisch die gesamte Energieintegration über der schraffierten Fläche stattfindet. Eine Rechnung für $q = 0.014 \text{ \AA}^{-1}$ (schwarz ausgefüllte Glockenkurve in Abb.16) ergibt, daß 99.997% des Integrals $\int_{-\infty}^{+\infty} F(q, \hbar\omega) d\omega$ über dem schraffierten Bereich liegen, da $F(q, \hbar\omega)$ außerhalb davon praktisch auf Null abgefallen ist. Daher gilt in ausgezeichneten Näherung:

$$\int_{\text{schraffierte Fläche}} d\omega F(q, \hbar\omega) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F(q=\text{const}, \hbar\omega) = 1$$

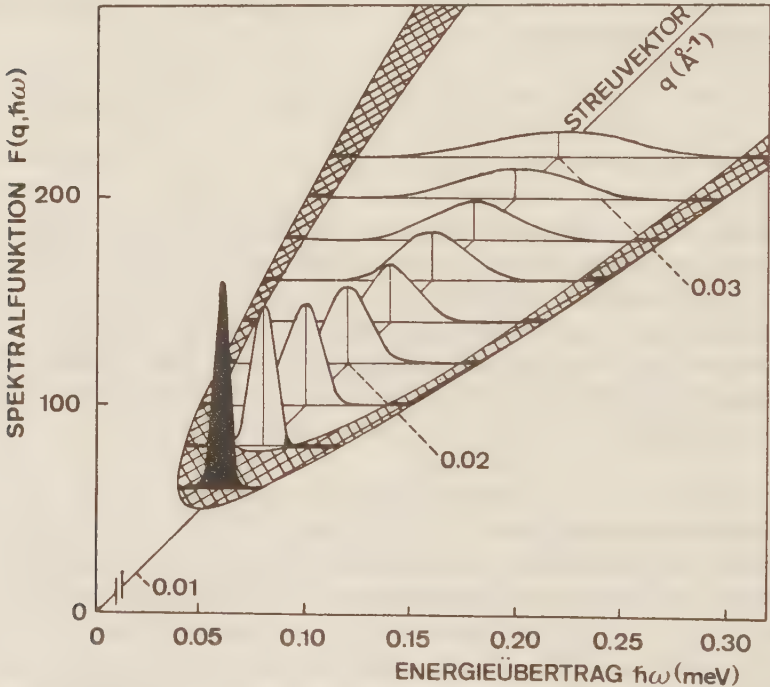


Abb.16 Darstellung der Spektralfunktion $F(q, \hbar\omega)$ als "Gebirge" über dem inelastischen Ansprechbereich (schraffierte Fläche aus Abb.15) des D11-Instruments für einen Streuwinkel $\theta=0.86$ Grad. Die Spektralfunktion wurde für eine reduzierte Temperatur $\tau=1.6 \cdot 10^{-3}$ und für mehrere Werte $q=\text{const.}$ im Bereich $0.014 \leq q \leq 0.032 \text{ \AA}^{-1}$ berechnet. Die Einheiten von $F(q, \hbar\omega)$ folgen aus der Normierung $\int_{-\infty}^{+\infty} F(q, \hbar\omega) d\omega = 1$.

Im Bereich der Schenkel der schraffierten "Parabel" ist die zu integrierende Intensität (schwarze Balken in Abb.16) so gering, daß sie fast keinen Beitrag liefert (für $q = 0.03 \text{ \AA}^{-1}$ liegen weniger als 1% des Gesamtintegrals über der schraffierten Fläche).

Diese Zahlen zeigen, daß die quasielastische Näherung, Gl.(58), für die Bedingungen dieses Experiments sehr gut erfüllt ist, d.h. die experimentelle Zählrate in ein Detektorelement unter dem Streuwinkel θ entspricht der statischen Streufunktion $\chi(q)$. Für andere Temperaturen im kritischen Bereich ändert sich qualitativ nichts, da die Breite der Spektralverteilung im wesentlichen von der starken $q^{5/2}$ -Abhängigkeit bestimmt wird, während die Temperatur einen im Vergleich dazu geringen Einfluß auf die Breite hat.

Zusätzlich wurde noch numerisch überprüft, ob die Integration des Zweiachsen-Instruments einen Einfluß hat auf die Maximumverschiebung der kritischen Streuung, die in dieser Arbeit für die experimentelle Bestimmung von η verwendet wird. Dazu wurde als Computersimulation des Experiments die Zählrate der kritischen Streuung berechnet unter Annahme der absoluten Gültigkeit der quasielastischen Näherung (wie auch bei der Ableitung der Gl.(43-57) für η verwendet) und unter Annahme der Energie-Integration, wie sie am Zweiachsen-Instrument unter experimentellen Bedingungen auftritt. Die Rechnungen (Programm ALS6) wurden in Temperaturschritten von 1/100 Kelvin im Bereich von T_c durchgeführt und daraus für beide Fälle die Temperatur des Maximums bestimmt (Tabelle 4). Es ergibt sich eine geringfügige Änderung der Maximumtemperatur von 1/100 bis 2/100 Kelvin, je nach Streuwinkel, womit der Fehler an der Grenze der experimentell möglichen Genauigkeit liegt. Die gemessene Maximumverschiebung (Abb.22) ist dagegen von der Größenordnung 0.1 bis 0.3 Kelvin für diese q -Werte.

Zusammenfassend ergibt sich, daß auf Grund der speziellen Voraussetzungen dieses Experiments (sehr kleine q -Werte, Wellenlängenverteilung der einfallenden Neutronen, Meßpunkte im kritischen Bereich nahe T_c) die gemessene Intensität am Zweiachsen-Diffraktometer proportional der statischen Korrelationsfunktion ist und keine nennenswerte Verfälschung der Ergebnisse für das Maximum der kritischen Streuung als Folge der quasielastischen Integration auftritt.

Tabelle 4 Vergleich der gerechneten Temperaturen $T_{\max}(\theta)$, dem Maximum der kritischen Streuung am Zweiachsen-Instrument bei Streuung in einen Winkel θ und $T_{\max}(q)$, dem Maximum bei Annahme der quasielastischen Näherung. Die Rechnungen wurden für zwei Werte des Streuwinkels θ (im unteren und oberen Drittel des experimentellen Meßbereichs), bzw. für die entsprechenden elastischen Streuvektoren $q = 4\pi/\lambda \sin(\theta/2)$ durchgeführt.

	Temperatur der maximalen Streuung	
	in einen Streuwinkel θ (Zweiachsen-Instrument) $T_{\max}(\theta)$	mit elastischem Streuvektor q (quasielast. Näherung) $T_{\max}(q)$
$\theta=0.81$ Grad $q=1.3 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$	$629.33 \pm 0.005 \text{ K}$	$629.34 \pm 0.005 \text{ K}$
$\theta=1.47$ Grad $q=2.4 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$	$629.45 \pm 0.005 \text{ K}$	$629.47 \pm 0.005 \text{ K}$

3.1.3 Bestimmung des Untergrundes der Streuung

Bei allen Streuexperimenten gibt es einen Untergrund von parasitärer Streuung, also der Zählrate am Detektor, die nicht vom untersuchten Effekt herrührt. Bei diesem Experiment ist die Zählrate der kritischen Streuung nahe der Phasenumwandlungstemperatur im untersuchten Kleinwinkelstreubereich um ein Vielfaches größer als die Zahl der Neutronen, die von anderen Effekten herrühren, was die Abschätzung des Untergrundes erheblich erleichtert. Es lassen sich prinzipiell zwei Ursachen von Untergrundstreuung unterscheiden:

- (i) Zählrate bei völlig geschlossenem Neutronenstrahl des eigenen Instruments. Die Ursache ist parasitäre Strahlung aus benachbarten Instrumenten und von γ - Strahlung. Nachdem kurz vor dem hier beschriebenen Experiment das gesamte D11-Instrument von außen mit borhaltigen Kunststoffplatten beklebt worden war, war (im Gegensatz zu früher) ein derartiger Untergrund nicht mehr nachweisbar.
- (ii) Parasitäre Streuung bei offenem Strahl. Die Probe erzeugt natürlich nicht nur kritische magnetische Streuung, sondern auch geringfügig Streuung durch andere Prozesse (Phononen, thermisch diffuse Streuung). Die Mehrfach-Braggstreuung, die auch im Kleinwinkelbereich auf den Detektor fallen kann, wurde durch eine geeignete Wahl der Wellenlänge ($6.65 \text{ \AA}$) von vornherein ausgeschlossen, da die Braggkante für Nickel bei $4.06 \text{ \AA}$ liegt. Außer von der Probe kann noch eine geringfügige Streuung von den Vakuumfenstern der Streukammer (Saphirglas) zum Untergrund beitragen.

Zur Bestimmung des Untergrundes wurde ein iteratives Verfahren gewählt. Am Anfang des Meßzyklus wurde bei einer Temperatur von ca. 30 Kelvin oberhalb T_c gemessen, wo die kritische Streuung schon so stark abgefallen ist (~ 10 Counts/Monitoreinheit/Detektorelement), daß sie in der Größenordnung des Untergrunds liegt und im gemessenen $\vec{q}$ -Bereich praktisch keine $\vec{q}$ -Abhängigkeit mehr zeigt. Im ersten Durchgang wird diese Untergrundmessung um den geschätzten Anteil der kritischen Streuung verringert und dann von allen anderen Messungen abgezogen. Diese werden auf kritische Exponenten, Amplituden usw. hin ausgewertet. Mit den Ergebnissen kann der Anteil der kritischen Streuung an der Untergrundmessung

erneut und jetzt wesentlich genauer bestimmt werden. Wie vorher wird dann diese verbesserte Untergrundbestimmung erneut von allen Messungen abgezogen und dann das Experiment wiederum ausgewertet. Es zeigte sich praktisch, daß dieses Verfahren bereits nach dem zweiten Durchlauf konvergiert und der Untergrund damit genau bestimmt ist.

Die Größenordnung des Untergrundanteils im Vergleich zum Meßeffect wird in Tab.5 für eine typische Messung der kritischen Streuung bei einer Temperatur von 630.50 Kelvin, das entspricht einer reduzierten Temperatur $\tau = 4.3 \cdot 10^{-4}$, für mehrere q-Werte angegeben.

Zur Bestimmung des Untergrundes wurde das Programm AN2 (siehe Anhang) verwendet.

Tab.5 Untergrundanteil der gemessenen Zählrate im Vergleich zur Zählrate der kritischen Streuung bei einer reduzierten Temperatur von $\tau = 4.3 \cdot 10^{-4}$ für einige Werte des Streuvektors.

Streuvektor q ($\text{\AA}^{-1}$)	Untergrund (Counts/Monitor)	krit.Streuung bei $\tau=4.3 \cdot 10^{-4}$ (Counts/Monitor)
$9.9 \cdot 10^{-3}$	36.0	771.7
$1.4 \cdot 10^{-2}$	20.2	384.0
$1.9 \cdot 10^{-2}$	15.6	227.3
$2.3 \cdot 10^{-2}$	13.1	149.7

3.2 Streukammer und Temperaturregelung des Ofens

An die Streukammer für diesen Versuch waren folgende Ansprüche zu stellen:

- (i) Die Streukammer ("Cloche") muß mechanisch in das Gefüge des D11-Instruments passen und eine durchgehend evakuierte Flugstrecke der Neutronen vom Reaktor bis zum Detektor gewährleisten. Die Probe muß darin so justiert sein, daß sie genau im Zentrum des Neutronenstrahls liegt.
- (ii) Die Probe muß von einem Ofen umgeben sein, der bei ca. 630 K eine Temperaturkonstanz und -Regelung auf besser als 10^{-2} K für die Zeit eines zweitägigen Meßzyklus gewährleistet.
- (iii) Am Ort der Probe muß das Erdmagnetfeld bis auf einen möglichst geringen Rest ($\leq 10^{-2}$ Oe) kompensiert sein.

Für die Realisierung dieser Anforderungen wurde gemeinsam mit v. Hörsten /35/ eine Streukammer mit einem speziellen Ofensystem konstruiert, die für dieses und mit kleinen Änderungen für ein parallel laufendes Experiment /35/ verwendet werden konnte. Eine schematische Darstellung der Streukammer ist in Abb. 17 wiedergegeben. Als Grobstufe wird ein äußerer Ofen auf eine Temperatur von ca. 30 K unterhalb der Meßtemperatur geheizt, um möglichst konstante Bedingungen für den geregelten inneren Ofen zu liefern. Dieser kann mit einem elektronischen Regler /35/ und einem Thermistor (oder einem Platin-Widerstandsthermometer) direkt an der Probe langzeitmäßig auf $5 \cdot 10^{-3}$ K genau konstant gehalten werden. Die Öfen sind mit einem doppelwandigen Hitzeschild aus Kupferblech umgeben, das es erlaubt auf eine Wasserkühlung zu verzichten. Die Ein- und Austrittsfenster für die Neutronen bestehen aus Saphirglas. Dieses Material verringert speziell im Kleinwinkelbereich den Untergrund an parasitärer Streuung gegenüber den üblichen Aluminium- oder Quarzfenstern. Die Neutronen werden am Eintrittsfenster mit einer kreisförmigen Blende aus Cadmiumblech ($\varnothing$ 20 mm) und direkt vor der Probe mit einer Lochblende ($\varnothing$ 5 mm) aus hitzebeständigem Bornitrit auf einen engen Strahl ausgeblendet. Das Magnetfeld wurde jeweils kurz vor den Experimenten bei geschlossenem Neutronenstrahl mit einer Sonde am Ort der Probe gemessen und mittels drei Paaren von Helmholtzspulen bis auf einen Rest von etwa $5 \cdot 10^{-3}$ Oe kompensiert.

Für weitere Details sei auf die ausführliche Beschreibung einer ähnlichen Streukammer mit Ofensystem verwiesen (Söffge /33,34/), die auch als Grundlage für die technisch verbesserte Version des Ofens diente, der für die hier beschriebenen Experimente verwendet wurde.

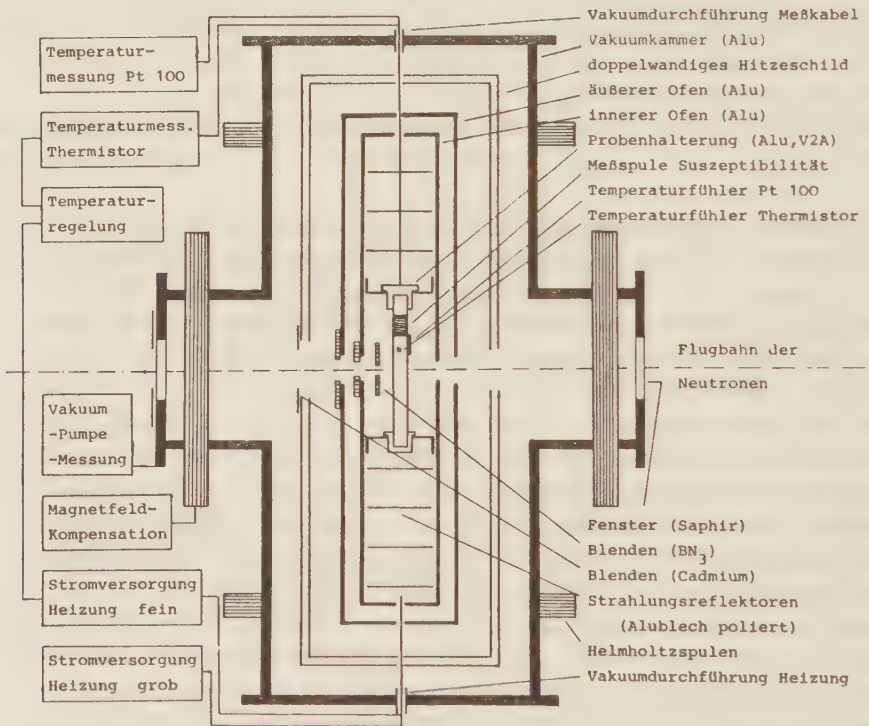


Abb.17 Schematische Darstellung der Streukammer

Als Probenmaterial wurde Nickel gewählt, da es von den in Frage kommenden ferromagnetischen Materialien die günstigsten Eigenschaften hat:

(1) Der magnetische Phasenübergang von Nickel liegt bei $T_C \approx 630$ K. Diese Temperatur ist groß genug, um in Einheiten der reduzierten Temperatur $\tau = (T - T_C)/T_C$ eine gute Auflösung zu erreichen und andererseits nicht so groß, um beim Ofenbau exotische und schwierig bearbeitbare Materialien zu benötigen.

(ii) Nickel hat keinen kristallographischen Phasenübergang zwischen der magnetischen Curie-Temperatur der Schmelztemperatur (wie z.B. Eisen), und lässt sich damit sehr gut als Einkristall aus der Schmelze mit relativ kleinem Mosaikspread (siehe unten) ziehen.

(iii) Im Vergleich zu anderen in Frage kommenden ferromagnetischen Materialien (wie z.B. EuO und EuS) hat Nickel einen wesentlich niedrigeren Absorptionsquerschnitt für thermische Neutronen und gewährleistet damit eine ausreichend hohe Zählrate.

Die Probe wurde von der Firma Materials Research Company (MRC), Orangeburg, N.Y.(USA), hergestellt. Der Einkristall wurde nach Czochalski-Verfahren aus der Schmelze gezogen (Reinheit 99.999 %). In Tabelle 6 sind die noch vorhandenen Verunreinigungen in ppm angegeben.

Tabelle 6 Chemische Analyse des Nickel-Einkristalls zur Bestimmung von Verunreinigungen in ppm.

CHEMISCHE ANALYSE (% x 10 ⁻⁴)													
C	O	H	N	B	Be	Al	F	Na	Mg	P	S	Cl	
10.0	<17.0	<1.0	<5.0	<0.01	<0.005	<0.2	<1.0	<3.0	<0.1		0.5	1.0	
K	Ca	Ti	Fe	Cu	Si	Cr	Ni	Zn	Ga	Se	Zr	Nb	
0.7	<0.6	0.04	30.0	5.0	<2.0	1.0	MAJOR	<1.0			0.4	<0.3	
Mo	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	Ta	W	Pt	Au	Pb	
			<1.0		<6.0	<2.0	<4.0	<10.0			<0.7	<0.3	
Analyse:												Sonstige <0,1	
☒ Massen-spektrographie				☐ Vakuumfusion (Gase)			☐ Emissions-spektrographie			☒ Konduktometrie (Kohlenstoff)			

Zur Überprüfung der Güte des Einkristalls wurde die Struktur des (200)-Bragg-Reflexes der Probe am γ -Spektrometer des ILL /36/ gemessen. Die Rockingkurve (Abb.18) und damit der Mosaikspread des Kristalls haben eine Breite (FWHM) von 3.7 Winkelminuten. Die abgebildete Rockingkurve wurde an der Meßposition der Probe aufgenommen, d.h. an der Stelle, wo beim Experiment der ausgeblendete Neutronenstrahl auftraf. An anderen Stellen des Kristalls ist das Bild der Rockingkurven ähnlich.

Die Form und Orientierung der Probe ist ein Zylinder (Länge 80 mm und Durchmesser 6.5 mm) mit Längsachse in $\langle 001 \rangle$ -Richtung. Die Fehl-orientierung beträgt nach Angaben des Herstellers maximal 2 Grad; sie ist nach eigenen Auswertungen von Laue-Aufnahmen wesentlich geringer (0.5 bis 1 Grad). In der Probenhalterung steht der Kristall mit der Stabachse senkrecht zur Flugrichtung der Neutronen und ist so justiert, daß die Neutronen entlang der $\langle 100 \rangle$ -Achse den Kristall durchdringen.

Vor dem Experiment wurde der Kristall 15 Stunden bei 1400 Kelvin in einer Wasserstoffatmosphäre getempert, um innere Spannungen des Kristallgefüges zu verringern.

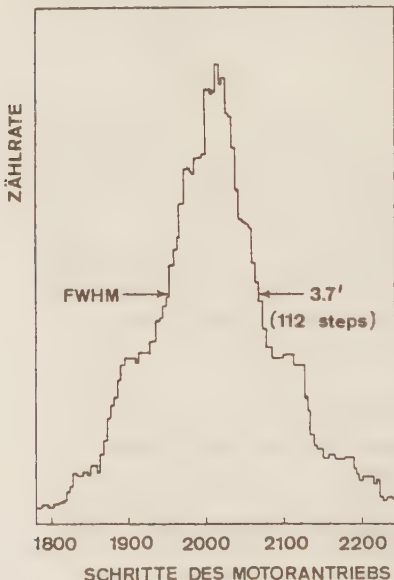


Abb.18 γ -Rockingkurve des (200)-Reflexes des Einkristalls. Als Abszisse sind die Einheiten des Schrittmotorzählers angegeben, wobei ein Schritt zwei Winkelsekunden entspricht. Der Nullpunkt des Schrittmotorzählers ist willkürlich eingestellt.

4. Experimentelle Ergebnisse und deren Diskussion

Am Beginn der Diskussion der Ergebnisse des Experiments seien alle experimentellen Parameter des Instruments zusammengefaßt:

Wellenlänge der Neutronen	: 6.65 Å
Verteilung der Wellenlänge ($\Delta\lambda/\lambda_0$)	: 9% FWHM
Kollimationsstrecke der Neutronen	: 10 m
Durchmesser des vor der Probe ausgeblendeten Strahls	: 5 mm
Abstand Probe - Detektor	: 10.55 m
Bereich des Streuvektors	: $5 \cdot 10^{-3} \leq \vec{q} \leq 3 \cdot 10^{-2} \text{ Å}^{-1}$
mittlere Auflösung des Streuvektors	: 8% FWHM
Meßzeit pro Einzelexperiment (Counts per Monitor)	: 40 000 Counts am Monitorzähler entsprechen ca. 32 Minuten

4.1 "Scaling" - Verhalten der kritischen Streuung

In Figur 19 sind die Zählraten $I(q, T = \text{const})$ der kritischen Streuung für einige typische Messungen bei verschiedenen Temperaturen wiedergegeben. Dargestellt ist als Abszisse der Streuvektor (untere Skala), bzw. der Streuwinkel (obere Skala), die für kleine Winkel proportional sind und als Ordinate die gestreute Intensität in Counts per Monitor (gewählte Monitorzählrate 40 000 entspricht etwa 32 Minuten pro Messung). Typisch für die kritische Streuung ist der starke Anstieg der Zählrate bei Annäherung an die Umwandlungstemperatur T_C und zwar besonders ausgeprägt für kleine Werte des Streuvektors. Ein enger Bereich um die Vorwärtsrichtung ($q=0$) ist wegen der notwendigen Abdeckung des Primärstrahls durch ein Cadmium-Blech (Beamstop) der Messung nicht zugänglich.

Nach der Skalentheorie /9/, siehe Kap. 2.3, sind die einzelnen $I(q, T = \text{const})$ -Kurven in Abb.19 nicht voneinander unabhängig, sondern lassen sich durch eine geeignete Transformation ineinander überführen. Dazu wird als Abszisse die skalierte dimensionslose Variable $y = q\xi(T)$ eingeführt, die eine Stauchung bzw. Streckung

der q -Skala, je nach Wert der Korrelationslänge und damit implizit der reduzierten Temperatur, bewirkt. Die Ordinate wird auf 1 normiert bei $q = y = 0$, was gleichbedeutend ist mit einer Division aller Meßwerte $I(q)$ jeweils durch die Intensität $I(q=0)$ bei gleicher Temperatur. Da direkt in Vorwärtsrichtung wegen des "Beamstops" nicht gemessen werden kann, muß $I(q \rightarrow 0)$ durch Extrapolation bestimmt

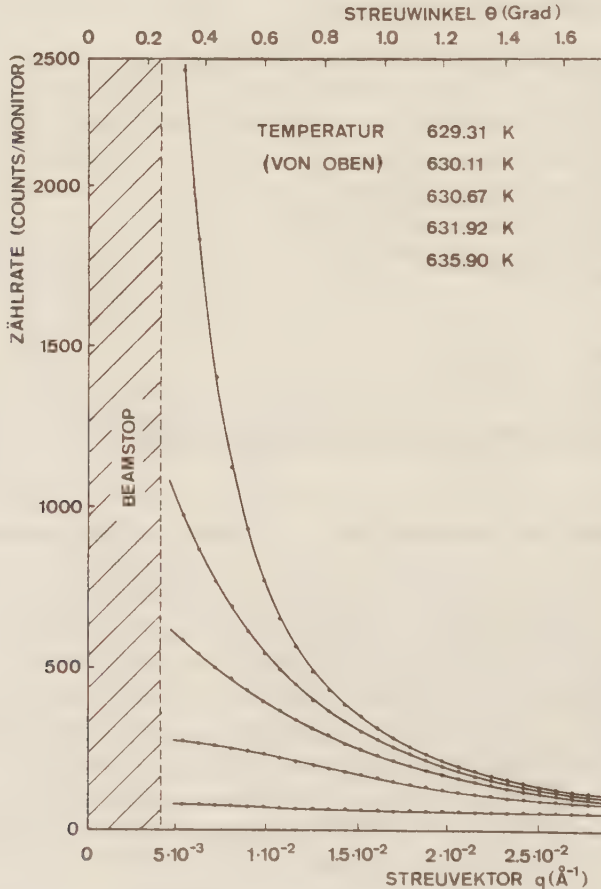


Abb.19 Streuintensität als Funktion des Streuvektors für verschiedene Temperaturen $T \geq T_C$ ($T_C = 629.23$ K). Der schraffierte Bereich ist auf Grund der Abdeckung des Primärstrahls durch den "Beamstop" nicht für eine Messung zugänglich.

werden. Unter Verwendung dieser Transformationen kann das "Scaling"-Verhalten unserer experimentellen Ergebnisse sehr eindrucksvoll in Fig.20 dargestellt werden: Alle 572 Meßwerte aus 22 Messungen $I(q, T = \text{const})$ bei verschiedenen Temperaturen (darunter die 5 Meßkurven aus Abb.19) oberhalb T_C fallen mit großer Genauigkeit auf eine gemeinsame Kurve, die Skalenfunktion $\hat{D}(y)$. Ein stark vergrößerter Ausschnitt davon, in dem die einzelnen Meßpunkte besser erkannt werden können, ist in Abb.21 wiedergegeben. Diese eindeutige Überlagerung aller $I(q, T = \text{const})$ -Kurven in Abb.20 und 21 bedeutet eine experimentelle Verifikation der Vorhersage aus der Skalentheorie von Kadanoff /9/, daß die Korrelationsfunktion bzw. Skalenfunktion im kritischen Temperaturbereich nicht mehr von zwei unabhängigen Variablen q und T (bzw. ξ) abhängt, sondern nur noch von einer dimensionslosen Größe $y = q\xi$.

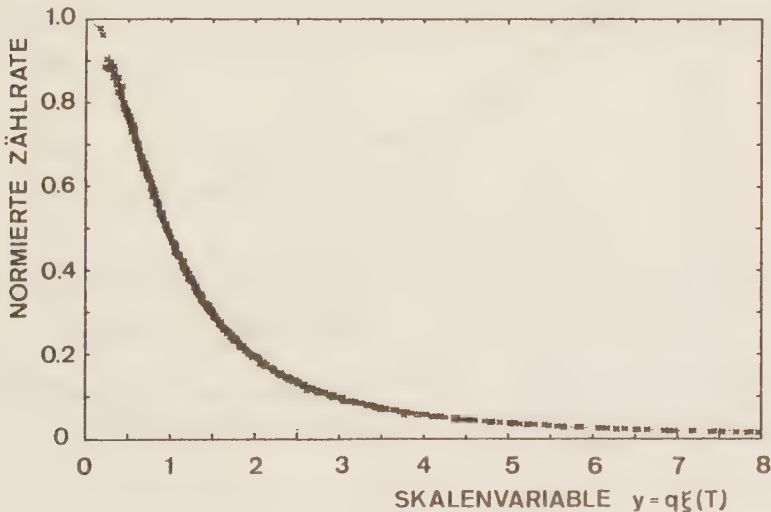


Abb.20 Überprüfung des "Scaling"-Verhaltens der Meßwerte. Durch geeignete Normierung fallen mehr als 500 Meßpunkte aus $I(q, T = \text{const})$ -Kurven bei 22 verschiedenen Temperaturen ($T_C + 0.03 \leq T \leq T_C + 8.2$ Kelvin) auf einen gemeinsamen Kurvenzug. Als Approximand der Skalenfunktion ist eine Lorentz-Funktion ($1/(1+y^2)$) eingezeichnet (durchgezogene Linie), die nahezu vollständig mit den Meßdaten übereinstimmt bzw. überdeckt wird.

Im Vergleich zu anderen experimentellen Arbeiten wurde das "Scaling"-Verhalten der kritischen Streuung erstmals an einer so großen Anzahl von Meßpunkten aus einem relativ großen Bereich des Streuvektors und der Temperatur überprüft. Weiterhin bestätigen die experimentellen Ergebnisse in Abb.20 und 21 die theoretischen Überlegungen aus Kap.2.3.2 : Im gemessenen y -Bereich ist keine Abweichung der experimentellen Skalenfunktion von einer Lorentzform $D_{LO}(y) = 1/(1+y^2)$ zu erkennen, die als durchgezogene Linie in den Abbildungen eingezeichnet ist.

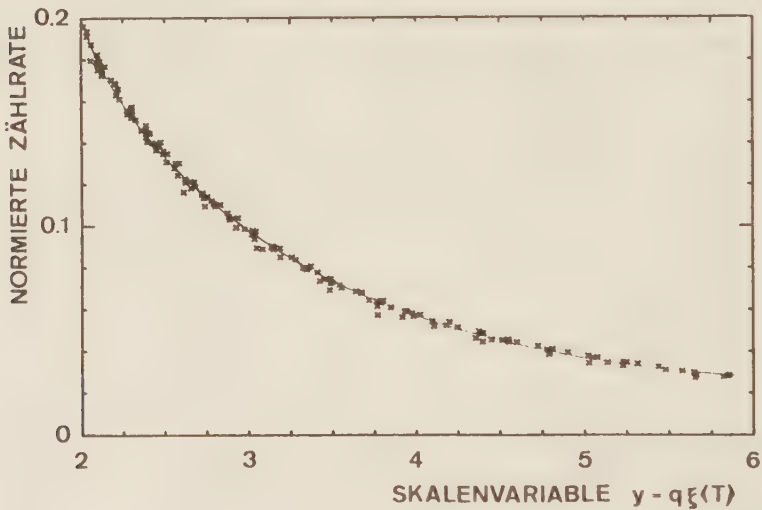


Abb.21 Ausschnitt aus Abb.20 mit Vergrößerung des Maßstabs der Ordinate um einen Faktor 5 und der Abszisse um einen Faktor 2.

4.2 Experimentelle Bestimmung der kritischen Exponenten γ und ν

Das divergente Verhalten von statischer Suszeptibilität $\chi(T)$ und Korrelationslänge $\xi(T)$ im Bereich der kritischen Temperatur T_C wird durch die Potenzgesetze

$$\chi(T) = \chi_0 \left(\frac{T-T_C}{T_C} \right)^{-\gamma} = \chi_0 \tau^{-\gamma} \quad (66)$$

$$\xi(T) = \xi_0 \tau^{-\nu} \quad (67)$$

beschrieben. Aus den experimentellen Daten $I(q, T=\text{const})$ können für jede Temperatur die Werte von $\chi(T)$ als auf $q \rightarrow 0$ extrapolierte Intensität und von $\xi(T)$ als doppelte reziproke Halbwertsbreite der Streufunktion bestimmt werden. Diese Auswertung wurde numerisch mit dem Programm AN5F, das im Anhang wiedergegeben ist, durchgeführt. Eine doppelt-logarithmische Auftragung der damit gewonnenen Ergebnisse entsprechend

$$\log \chi(T) = -\gamma \log \tau + \log \chi_0 \quad (68)$$

$$\log \xi(T) = -\nu \log \tau + \log \xi_0 \quad (69)$$

ergibt als Steigung die kritischen Exponenten γ bzw. ν und aus dem Achsenabschnitt die Amplituden χ_0 und ξ_0 . In Abb.22 ist der Logarithmus der stat. Suszeptibilität bzw. der Korrelationslänge als Funktion des Logarithmus der reduzierten Temperatur dargestellt. Ein Geraden-Fit (Programm WU6P) ergibt die experimentellen Zahlenwerte von $\gamma = 1.378 \pm 0.005$ und $\nu = 0.701 \pm 0.004$, sowie $\xi_0 = 1.27 \pm 0.03 \text{ \AA}$. Im Fit wurde die kritische Temperatur ($T_C = 629.23 \text{ K}$) nicht als freier Parameter benutzt, sondern fest vorgegeben, da T_C aus der Maximumverschiebung der Streuung erheblich genauer festgelegt werden kann. Zur Kontrolle wurde jedoch T_C auch direkt aus den log-log Fit bestimmt, was innerhalb der Fehlergrenzen zu den gleichen Ergebnissen führte.

Die Amplitude der Korrelationslänge ξ_0 kann aus dem Experiment in absoluten Einheiten ($\text{\AA}$) ausgewertet werden, da auch die Halbwertsbreite $2/\xi(T)$ der Streufunktion in absoluten Einheiten des Streu-

vektors ($\text{\AA}^{-1}$) bestimmt wird. Dagegen ist $\chi(T)$ nur in relativen Einheiten (Counts per Monitor) bekannt, und damit auch die Amplitude χ_0 nur in relativen Einheiten (das Experiment ergab $\text{const.} \cdot \chi_0 = 0.165 \text{ Counts/Monitor}$).

Die Diskussion der experimentell ermittelten Zahlenwerte im Vergleich zu theoretischen Rechnungen und anderen Experimenten folgt in Kap.4.4.

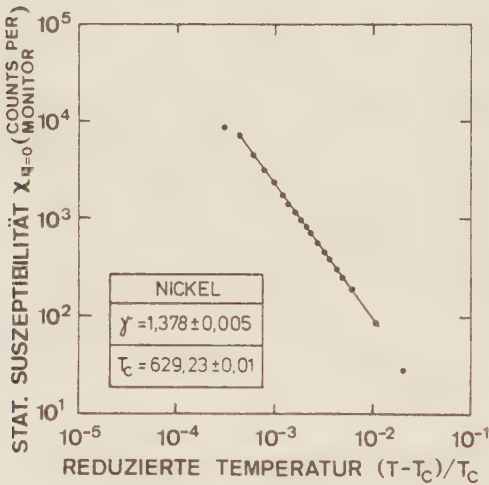
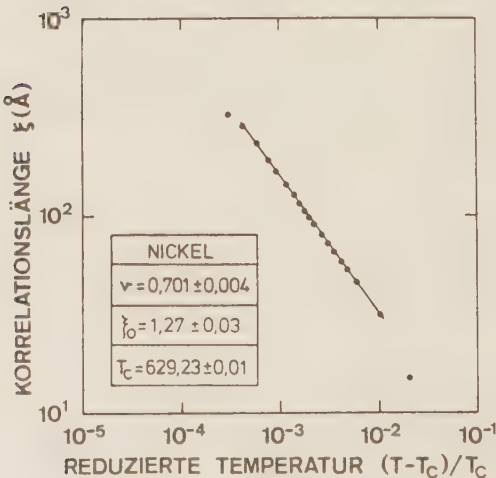


Abb.22 Doppelt-logarithmische Auftragung von statischer Suszeptibilität $\chi(T)$ und Korrelationslänge $\xi(T)$ über der reduzierten Temperatur τ . Der erste und letzte Meßpunkt wurde jeweils nicht für den Fit verwendet.



4.3 Bestimmung des Exponenten η aus der Temperatur $T_{\max}(q)$ des Maximums der kritischen Streuung

Der kritische Exponent η ist definiert durch die Linienform der kritisch gestreuten Intensität $I(q)$ genau an der Umwandlungstemperatur T_c

$$I(q, T=T_c) \sim q^{-2+\eta} \quad (70)$$

Da ein Experiment genau an T_c in einer für eine Auswertung nach Gl.(70) notwendigen Genauigkeit der Temperatureinstellung aus prinzipiellen Gründen nicht realisierbar ist, und von Tracy und Mc Coy /4/ gezeigt wurde, daß die übliche Methode zur η -Bestimmung aus den Approximanden der Streufunktion zweifelhaft ist, wird im folgenden erstmals die Verschiebung des Maximums der kritischen Streuung zur Bestimmung von η verwendet.

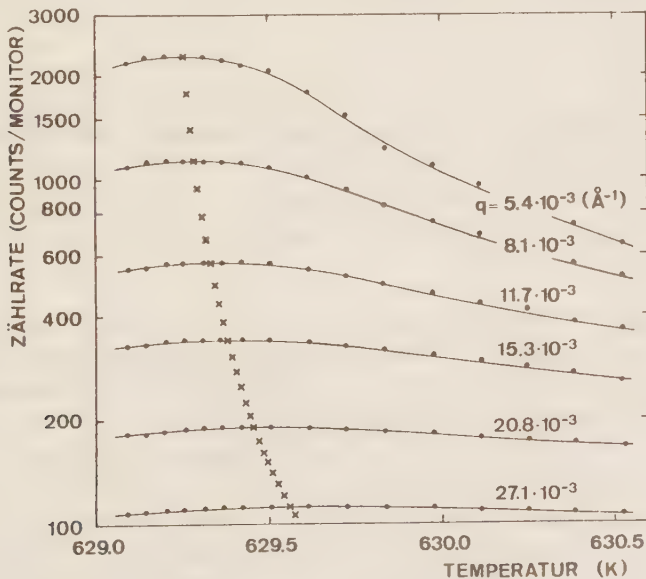


Abb.23 Streuintensität $I(q=\text{const}, T)$ als Funktion der Temperatur für einige der gemessenen q -Werte. Die Temperatur des Maximums ist für alle ausgewerteten q -Werte mit einem Kreuz markiert. Der logarithmische Maßstab der Ordinate dient dazu, alle gemessenen Daten in einer Abbildung darstellen zu können.

In Figur 23 sind die Zählraten $I(q=\text{const}, T)$ als Funktion der Temperatur für einige typische Werte des Streuvektors q dargestellt. Der logarithmische Maßstab der Ordinate wurde gewählt, um trotz des immensen Anstiegs der gestreuten Intensität für kleine q 's alle Meßkurven in einer Figur darstellen zu können. Als optischer Nachteil muß jedoch in Kauf genommen werden, daß die Maxima, die im linearen Maßstab für kleine q sehr scharf sind, durch den Logarithmus deutlich abgeflacht werden.

Die Meßpunkte $I(q=\text{const}, T)$ wurden als Funktion der Temperatur für jeden gemessenen Wert des Streuvektors q an Potenzreihen der Form $(a_0 + a_1 T + \dots + a_6 T^6)$ "least-square" gefittet (Programm MAX1), die in Abb.23 als durchgezogene Linien eingezeichnet sind. Die aus den Koeffizienten a_1 der Potenzreihen berechneten Maxima $T_{\max}(q)$ sind für alle Werte von q in Abb.23 als (x) dargestellt.

Die Beziehung zwischen $T_{\max}(q)$ und dem Streuvektor q wurde in Gl.(45) und (46) abgeleitet

$$T_{\max}(q) = T_C + m q^{1/\nu} ,$$

wobei die experimentell bestimmbare Proportionalitätskonstante m ein Ausdruck ist für

$$m = T_C \xi_0^{1/\nu} y_{\max}^{-1/\nu} .$$

Entsprechend der obigen Gleichung wurde in Abb.24 die Temperatur $T_{\max}(q)$ als Funktion von $q^{1/\nu}$ (experimentell bestimmter Wert $\nu = 0.701$ aus Abb.22) aufgetragen. Die von der Theorie vorhergesagte lineare Abhängigkeit wird von den Meßwerten sehr gut erfüllt. Ein Geraden-Fit an die experimentellen Daten (Programm ETA) ergibt einen Zahlenwert für die Steigung $m = 56.3 \pm 4.1 \text{ K } \text{\AA}^{1/\nu}$. Der Achsenabschnitt der Gerade liefert eine sehr genaue Bestimmung der Curietemperatur, da definitionsgemäß gilt $T_C = T_{\max}(q=0)$. Der Fit ergibt $T_C = 629.23 \pm 0.01$ Kelvin. Die angegebene Genauigkeit gilt relativ zu den anderen im Experiment bestimmten Temperaturen. Für eine absolute Genauigkeit muß der systematische Fehler des Platin-Widerstandsthermometers von ± 2.2 Kelvin in Betracht gezogen werden.

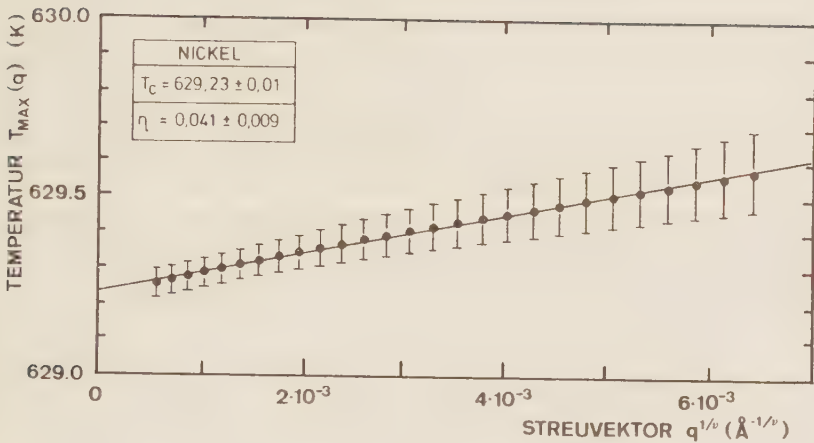


Abb.24 Temperatur $T_{\max}(q)$ der maximalen Streuintensität als Funktion von $q^{1/\nu}$ (experimentell bestimmter Wert $\nu = 0.701$ aus Abb.22)

Unter Verwendung dieser experimentellen Ergebnisse ($\xi_0 = 1.27 \pm 0.03$ Å und $\nu = 0.701 \pm 0.004$ aus dem log-log-Fit der Korrelationslänge, sowie $m = 56.3 \pm 4.1$ K Å $^{1/\nu}$ und $T_C = 629.23 \pm 0.01$ K aus der Maximumverschiebung) können der kritische Exponent η und das skalierte Maximum der Korrelationsfunktion $y_{\max}$ aus den Gl.(46) und (57) berechnet werden:

$$\eta = \frac{2}{m^{-2\nu} \xi_0^2 T_C^{2\nu} + 1}$$

$$y_{\max} = m^{-\nu} \xi_0 T_C^{\nu}$$

Ein Einsetzen der Zahlenwerte ergibt für den kritischen Exponenten der Korrelationsfunktion $\eta = 0.041 \pm 0.009$ und für das Maximum der Korrelationsfunktion $y_{\max} = 6.90 \pm 0.50$. Damit wurde, entsprechend den theoretischen Überlegungen in Kap.2, zum ersten Mal der Exponent η experimentell einwandfrei ermittelt.

4.4 Vergleich der gemessenen Zahlenwerte von η , γ und ν mit Ergebnissen aus theoretischen Arbeiten und anderen Experimenten

Theoretische Ansätze für die Berechnung der kritischen Exponenten für 3d-Systeme gibt es unter Verwendung zweier völlig verschieden-er Methoden: (i) Näherungsweise Durchrechnen eines Modellsystems vom Hamilton-Operator bis zu den kritischen Exponenten (Hochtemperatur-Reihenentwicklung) und (ii) Untersuchung der Transformations-eigenschaften eines Modellsystems (Renormalisierungsgruppe).

In Tabelle 7 sind für ein 3d-Heisenberg-Modell die derzeit besten gerechneten Werte für die Exponenten, sowohl mit Renormalisierungs-Technik (Le Guillou und Zinn-Justin /3/) als auch mit Hochtempera-tur-Reihenentwicklung (Ritchie und Fisher /13/), sowie unsere experimentellen Ergebnisse für Nickel zusammengestellt. Die zahlen-mäßige Übereinstimmung zwischen unseren Ergebnissen und den beiden theoretischen Arbeiten ist für γ und ν ausgezeichnet, während für η , auf Grund der extrem schwierigen experimentellen als auch theoretisch-rechnerischen Bestimmbarkeit, die Abweichungen und Fehlergrenzen etwas größer sind. Unser experimenteller Wert für η liegt näher am theoretischen Wert aus der Reihenentwicklung als am Renormalisierungsgruppen-Ergebnis; jedoch ist der experimentelle Fehler sicher zu groß, um damit über die Güte der beiden theoreti-schen Werte zu entscheiden. Außerdem überlappen sich die Fehlerbe-reiche aller drei η -Werte.

Entsprechend dem Skalengesetz (Gl.(9)) sind die kritischen Exponen-ten η , ν und γ durch die Beziehung $(2-\eta)\nu = \gamma$ miteinander verknüpft. Das erlaubt zusätzlich eine indirekte Bestimmung von η aus den beiden anderen gemessenen Exponenten γ und ν , und ergibt

$$\eta = 2 - \gamma/\nu = 0.034 \pm 0.013 ,$$

was innerhalb der Fehlergrenzen gut mit unserer direkten Bestimmung von η aus der q-Verschiebung des Streumaximums übereinstimmt.

Von Ritchie und Fisher /13/ wurde die Amplitude der Korrelationslänge für ein 3d-Heisenberg-Modell berechnet, mit dem Ergebnis $a_{nn}/\xi_0 = 1.90$ für ein Spin(1/2)-System mit fcc-Gitter. Unter Verwendung von $a_{nn} = 2.49 \text{ \AA}$ (nächster Nachbar Gitter-Abstand für Nickel und $\xi_0 = 1.27 \text{ \AA}$ (aus Abb.22) ergibt sich ein experimenteller Wert von $a_{nn}/\xi_0 = 1.96$.

Es soll nicht unerwähnt bleiben, daß die theoretischen Rechnungen, deren Ergebnisse hier dargestellt sind, von einem lokalisierten Spinmodell ausgehen, während es sich im Experiment mit Nickel eher um einen Bandmagneten handelt. Theoretische Rechnungen über das Verhalten eines Bandmagneten im Bereich der kritischen Temperatur sind nicht bekannt. Es liegt jedoch nahe anzunehmen, daß der Phasenübergang von Nickel sich genauso isotrop verhält, wie es annähernd alle bekannten Materialeigenschaften von Nickel in diesem Temperaturbereich tun. Damit erscheint es angebracht, die experimentellen Ergebnisse mit einem isotropen Modell zu vergleichen, wie es beim Phasenübergang das Heisenberg-Modell darstellt. Diese Annahme wird dadurch bestärkt, daß nach den theoretischen Rechnungen die Zahlenwerte der kritischen Exponenten eine deutliche Abhängigkeit von n zeigen (z.B. $\gamma_{n=1} = 1.241$, $\gamma_{n=3} = 1.386/4$), unsere Messungen von γ und ν aber sehr genau mit den theoretischen Heisenberg-Zahlenwerten übereinstimmen.

Im unteren Teil von Tabelle 7 sind zum Vergleich noch einige weitere experimentelle Ergebnisse der kritischen Exponenten von Ferromagneten aufgeführt. Da η und ν prinzipiell nur einem Streuexperiment zugänglich sind, konnten verlässliche Experimente nur in den letzten Jahren durchgeführt werden, seit ausreichend starke Neutronenquellen zur Verfügung stehen. In Brookhaven wurden für EuS und EuO /38/, die am ehesten experimentell einem isotropen lokalisierten Heisenbergmodell entsprechen, die Exponenten ν und γ bestimmt, die wie unsere Ergebnisse ausgezeichnet mit der Theorie übereinstimmen. Dagegen sind die Exponenten für Kobalt /39/, das ein anisotropes Verhalten zeigt, zahlenmäßig deutlich kleiner und damit Ising-ähnlicher. Eine Neutronenmessung an Eisen /40/ liefert ebenfalls einen verhältnismäßig kleinen Wert für γ . Diese relativ alte Messung muß aber auf Grund des geringeren Neutronenflusses als ziemlich unsicher angesehen werden. Das gleiche gilt auch für die beiden bisher durchgeführten Neutronenstreuexperimente

an Nickel /41,42/, wo von den Autoren entsprechend hohe Fehlerintervalle für die Exponenten angegeben werden. Als Beispiele für eine Bestimmung des Exponenten γ an Nickel mit anderen Methoden als Neutronenstreuung seien zwei Experimente zitiert, eine Suszeptibilitätsmessung /43/ und eine Bestimmung über eine Magnetisierungsmessung /44/.

Tabelle 7 Zusammenstellung der Zahlenwerte für η , ν und γ aus diesem Experiment, theoretischen Rechnungen für das 3d-Heisenberg-Modell und einigen ausgewählten Experimenten an Ferromagneten.

	η	ν	γ
Dieses Experiment	0.041 ± 0.009	0.701 ± 0.004	1.378 ± 0.005
Hochtemp. Reihenentwicklung /13/	0.043 ± 0.014	0.7025 ± 0.02 $- 0.01$	1.375 ± 0.02 $- 0.01$
Renormalisierungsgruppe /3/	0.033 ± 0.004	0.705 ± 0.003	1.386 ± 0.004
EuO /38/		0.681 ± 0.017	1.387 ± 0.036
EuS /38/		0.702 ± 0.022	1.399 ± 0.040
Kobalt /39/		0.65 ± 0.04 ⁺⁾	1.23 ± 0.05 ⁺⁾
Eisen /40/			1.30 ± 0.04
Nickel /41/		0.66 ± 0.10 $- 0.07$	
Nickel /42/			1.58 ± 0.15
Nickel /43/			1.41 ± 0.02
Nickel /44/			1.34 ± 0.01

⁺⁾ Kobalt ist anisotrop, d.h. $n \neq 3$

5. Zusammenfassung

Im Jahr 1975 wurde in einer theoretischen Arbeit von Tracy und McCoy /4/ nachgewiesen, daß alle bis dahin vorliegenden Experimente zur Bestimmung des kritischen Exponenten η der Korrelationsfunktion aus physikalischen Gründen unbrauchbar waren, da die Meßdaten bei der Auswertung jeweils an mathematische Funktionen gefittet worden waren, die sich für den Bereich der Meßwerte als nicht gültig erwiesen. In dieser Arbeit wird erstmals eine andere Methode zur Bestimmung des Exponenten η verwendet, die die Verschiebung der Temperatur der maximalen kritischen Streuung als Funktion des Streuvektors ausnutzt. Diese Maximumverschiebung war erstmals von Fisher und Burford /12/ theoretisch vorausgesagt worden. Die prinzipielle Verwendbarkeit des Effekts für die η -Bestimmung wird in dieser Arbeit an einem vorhandenen theoretisch gerechneten Datensatz /4/ der Korrelationsfunktion des exakt lösbaren 2d-Ising-Modells überprüft und nachgewiesen.

Die experimentellen Untersuchungen wurden am 3d-magnetischen Phasenübergang von Nickel durchgeführt. Die Neutronenstreuexperimente fanden am Höchstflußreaktor des Instituts Laue-Langevin in Grenoble statt. Nur dort war es möglich, bei kleinen Streuvektoren ($|\vec{q}| < 3 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$) und sehr guter q -Auflösung (Multidetektor mit 1-cm²-Elementen) auch eine ausreichend hohe Zählrate zu erhalten. Um möglichst dicht an der Umwandlungstemperatur T_c messen zu können, mußte eine Streukammer mit einem speziellen Ofensystem konstruiert werden, das eine stabile und sehr genaue Temperaturregelung ($\Delta T < 5 \cdot 10^{-3} \text{ K}$) ermöglichte.

Die Auswertung der Maximumverschiebung der kritischen Streuung ergab einen experimentellen Wert für den kritischen Exponenten $\eta = 0.041 \pm 0.009$. Damit wurde η zum ersten Mal physikalisch einwandfrei im Sinne der Kriterien von Tracy und McCoy /4/ an einem magnetischen System (und möglicherweise überhaupt für irgendein System) gemessen. Aus dem gleichen Experiment konnten auch die kritischen Exponenten der Korrelationslänge ($\nu = 0.701 \pm 0.004$) und der statischen Suszeptibilität ($\gamma = 1.378 \pm 0.005$) mit großer Genauigkeit bestimmt werden, wobei alle Werte eine ausgezeichnete Übereinstimmung zu theoretischen Rechnungen /3/ für ein 3d-Heisenberg-Modell zeigen.

Als weiteres Ergebnis konnte das "Scaling"-Verhalten der kritischen Streuung im Vergleich zu früheren Experimenten überzeugend demonstriert werden. Entsprechend der Skalentheorie /9/ ist die Streufunktion der kritischen Streuung im kritischen Temperaturbereich nicht mehr von zwei unabhängigen Variablen, der reduzierten Temperatur $(T-T_c)/T_c$ und dem Streuvektor q , sondern nur noch von einer einzigen dimensionslosen Größe $y=q\xi(T)$ abhängig. Das Experiment zeigt, daß bei entsprechender Normierung alle gemessenen Streukurven $I(q)$ bei etwa 20 verschiedenen Temperaturen mit insgesamt mehr als 500 Meßpunkten auf eine einheitliche Kurve, die sogenannte Skalenfunktion, zusammenfallen.

6. Literaturverzeichnis

- /1/ K. Stierstadt, Physikalische Blätter 34 , 304 (1978)
- /2/ M.E. Fisher, Rev.Mod.Phys. 46, 579 (1974) und
K.G. Wilson, Sci.America , Aug. 1979, 140
- /3/ J.C. LeGuillou und J. Zinn-Justin, Phys.Rev. B 21, 3976 (1980)
- /4/ C.A. Tracy und B.M. Mc Coy, Phys.Rev. B 12, 368 (1975)
- /5/ R. Anders und K. Stierstadt, Sol.State Commun. 39, 185 (1981)
- /6/ L.S. Ornstein und F. Zernike , Proc.Sect.Sci.K.med.Akad.Wet.
17, 793 (1914)
- /7/ L. van Hove, Phys.Rev. 95, 249 und 1374 (1954)
- /8/ M.E. Fisher, J.Math.Phys. 5, 944 (1964)
- /9/ L.P. Kadanoff et al., Rev.Mod.Phys. 39, 395 (1967)
- /10/ K.G. Wilson, AIP Conf.Proc. 10, 843 (1972)
- /11/ S.-K. Ma, Modern Theorie of Critical Phenomena,
Benjamin, Reading, Mass. (1976)
- /12/ M.E. Fisher und R.J. Burford, Phys.Rev. 156, 583 (1967)
- /13/ D.S. Ritchie und M.E. Fisher, Phys.Rev. B 5, 2668 (1972)
- /14/ K.G. Wilson, Phys.Rev. Lett. 28, 548 (1972)
- /15/ W. Marshall und S.W. Lovesey, Theory of Thermal Neutron
Scattering, Clarendon Press, Oxford (1971)
- /16/ A.J. Bray, Phys. Rev. B 14, 1248 (1976)
- /17/ M.E. Fisher und A. Aharony, Phys. Rev. B 10, 2818 (1974)
- /18/ K.G. Wilson und J.Kogut, Physics Reports 12, 75 (1974)
- /19/ C.A. Tracy und B.M. Mc Coy, Phys. Lett. 46A, 371 (1974)
- /20/ H.E. Stanley, Phase Transitions and Critical Phenomena,
Clarendon Press, Oxford (1971)
- /21/ D. Bally, B. Grabcev, M.Popovici, M. Totia und A.M. Lungu
J.Appl.Phys. 39, 459 (1968)

- /22/ K. Blinowski und R. Ciszewski, Phys.Lett. 28A, 389 (1968)
- /23/ N. Stump und G. Maier, Phys.Lett 12, 625 (1967)
- /24/ M. Popovici, Phys.Lett. 34A, 319 (1971)
- /25/ J. Als-Nielsen, Phys.Rev 185, 664 (1969)
- /26/ J. Als-Nielsen, Phys.Rev.Lett. 25, 730 (1970)
- /27/ K. Ibel, J. Appl.Cryst. 9, 296 (1976)
- /28/ R. Ghosh, ILL International Report 78GH247T (1978)
- /29/ B.I. Halperin und P.C. Hohenberg, Phys.Rev. 177, 952 (1969)
- /30/ P. Résibois und C. Piette, Phys.Rev.Lett 24, 514 (1970)
- /31/ C. Joukoff-Piette and P. Résibois, Phys.Lett. 42A, 531 (1973)
- /32/ J. Hubbard, J.Phys. C4, 53 (1971)
- /33/ F. Söffge, Thesis Universität München (1977)
- /34/ F. Söffge, Nuc.Inst. 142, 399 (1977)
- /35/ W.v. Hörsten, Thesis Universität München (1981)
- /36/ J.R. Schneider, Acta Cryst. A33, 235 (1977)
- /37/ G.A. Baker und J.M. Kincaid, Phys.Rev.Lett. 42, 1431 (1979)
- /38/ J. Als-Nielsen, O.W. Dietrich und L. Passell, Phys.Rev. B14,
4908 (1976)
- /39/ C.J. Glinka, V.J. Minkiewicz und L. Passell, Phys. B16,
4084 (1977)
- /40/ L. Passell, K. Blinowski, T. Brun und P. Nielsen, Phys.Rev.
139 A 1866 (1965)
- /41/ G. Maier und N. Stump, Z.Physik 238, 389 (1970)
- /42/ V.J. Minkiewicz, M.E. Collins, R. Nathans und G. Shirane,
Phys. Rev. 182, 624 (1969)
- /43/ N. Herzum, K. Stierstadt und L. Wunsch, Phys.Stat.Sol.(a) 21,
529 (1974)
- /44/ J.S. Kouvel und J.B. Comley, Phys.Rev.Lett. 20, 1237 (1968)

7. Anhang: Zusammenstellung der verwandten numerischen Programme

Die Auswertung der experimentellen Ergebnisse (insgesamt ca. 10^5 Einzeldaten) wurde an der DEC-10 Großrechenanlage des Instituts Laue-Langevin in Grenoble durchgeführt. Die verwendeten Programme wurden fast ausschließlich für die Auswertung dieses Experiments neu geschrieben, aber im Konzept so allgemein angelegt, daß sie auch zur Auswertung anderer Experimente (z.B./35/) mit nur geringen Änderungen verwendbar sind. Für spezielle mathematische Probleme werden Unterprogramme aus der "Harwell Scientific Subroutine Library", die am DEC-10 System zur Verfügung steht, aufgerufen. Unterprogramme, die den Daten-Transfer vom Instrument-Computer zur DEC-10 steuern, sowie Rahmenprogramme für die graphische Darstellung von Ergebnissen, wurden von der "Central Computer Group" des ILL zur Verfügung gestellt.

Im folgenden sind die Fortran-10 Versionen der wichtigsten verwendeten Programme dargestellt. Dabei wird jeweils nur das Rahmenprogramm wiedergegeben, das die physikalisch relevanten Programmschritte enthält, während auf einen Abdruck der rein mathematischen Unterprogramme, z.B. der Fit-Routinen und der Programmteile, die den Datenaufbau und -Speicherung steuern, aus Platzgründen verzichtet wurde.

WU1	Radiale Umgruppierung der Detektorzellen
AN2	Bestimmung der Untergrundstreuung
AN5	Bestimmung von $\xi(T)$ und $\chi(T)$
WU6P	Log-Log-Plot für v und γ
MAX1	Bestimmung des Maximums der $I(T)$ -Kurven
ETA	Bestimmung von η und $y_{\max}$
ALS6	Integration des Zweiachsendiffraktometers

PROGRAMM WU1

```

1 DIMENSION NUMEXP(2),ILATE(4),NUMRAN(5)
2 DIMENSION IBOHNE(0/4095),R(0/4095)
3 DIMENSION ILO(32),N(32),COUNTS(32),ERR(32)
4 DATA INST,'D11A'
5 TYPE 200
6000 FORMAT(7) PRINCP,LL(X0,Y0) WHENR(DISK/TAP)
7 READ(8,201),X0,Y0,ILIN
80000 FORMAT(2F,A5,A5)
9 DO 412 I=0,4095
10 NY=I/64
11 IX=I-64*NY
12 YI=NY
13 XI=IX
14 PX=ABS(XX-X0)
15 RY=ABS(YY-Y0)
16 R(I)=SQRT(MX**2+RY**2)
17 C
18 TYPE 214
19 FORMAT(1) GIVE NAME FOR DATA FILE
20 READ(8,215)NAME
21 FORMAT(A5)
22 CALL OP(1,NAME)
23 CONTINUE
24 C
25 LL=-1
26 TYPE 230
27 (COUNT, FIRST SPECTRUM, LAST SPECTRUM)
28 READ(8,240)NUM1,NUM2
29 FORMAT(2I)
30 LL=LL+1
31 NUMOP=NUM1+LL
32 IF(NUMOP.GT.NUM2) GO TO 300
33 IF(NUMOP.LO.0)GO TO 999
34 CO=CO+1
35 NUMOP=0
36 CALL MEMDEF,INST,TYPE,NUMOP,LONG,IREPER,NOMEXP
37 (DATE,NUMRAN,IDUNIF)
38 IF(NUMOP.EQ.-1)GO TO 220
39 IF(IREPER.EQ.2)GO TO 250
40 IF(IREPER.EQ.0)GO TO 250
41 C
42 DO 290 K=1,32
43 ISU(K)=0
44 M(K)=0
45 DO 300 I=0,4095
46 K=R(I)+0.5
47 IF(K.GT.32.OR.K.EQ.0)GO TO 300
48 ISU(K)=ISU(K)+IBOHNE(I)
49 M(K)=M(K)+1
50 CONTINUE
51 C
52 WRITE(1,400)NUMOP,NAME,TEMP,X0,Y0
53 FORMAT(16,A6,3G15.7)
54 DO 420 K=1,32
55 SSU=ISU(K)
56 COUNTS(K)=SSU/M(K)
57 FM(K)=SQRT(SSU)/M(K)
58 WRITE(1,410)COUNTS(K),ERR(K)
59 FORMAT(2G15.7)
60 CONTINUE
61000 WRITE(8,450)NUMOP
620000 FORMAT(' OK ',T6)
630000 GOTO 245
640000 WRITE(6,810)
650000 FORMAT(1H1)
660000 WRITE(6,820) X0,Y0
670000 FORMAT(1H0,5X,'PRINCELL X0',F6.2,3X,'Y0',F6.2)
680000 WRITE(6,830)
690000 FORMAT(1H0,5X,'RADIUS',5X,'CELLS')
700000 DO 850 K=1,32
710000 WRITE(6,840) K,M(K)
720000 FORMAT(7X,13,7X,14)
730000 CONTINUE
740000 NULL=0
750000 WRITE(1,910)NULL,NAME,TEMP,X0,Y0
760000 FORMAT(16,A6,3G15.7)
770000 STOP
780000 END

```

PROGRAMM AN2

```

C
1 1P=KSLGR-CON(TO(37),1P(37),X(37),CG(32),
1A(700),1P(700),1P(700),2P(700),
2A(50),L(10),L(10),L(10),L(10),
CG(50),Y(50),Z(10),1P(10),CG(10),VALF,PRUUF
DATA 1/10,11/10,5,5,5,5/

C
TYPE 100
FORMAT(' (1) FILE NAME ' )
READ(8,100) NAME1, NAME2, 11
FORMAT(A5,1X,A5,1)
TYPE 115
FORMAT(' TC ' )
READ(8,110) TC
FORMAT(F)
IF (TC.EQ.0) GOTO 999
P1=3.14159265
DO 170 K=1,32
ALPHA=TAI/(CGT(P*K+.25)/115/100)
X(P)=4*P1/KL*5*5IM(ALPHA/2)

C
TYPE 150
FORMAT(' FIT RALGA (SP1 SUN) RADIUS (1-2) ' )
READ(8,160) K1,K2,Tk1,Tk2
FORMAT(A1)
T10=1K2-T1+1

C
CALL DATF(DA)
WRITE(8,180) DA(1),DA(2)
FORMAT(' A12 ',2A5/)
V(1)=.30
V(2)=1.25
V(3)=1.3816
V(10)=.7054
V(4)=1
V(6)=1
V(7)=1
V(8)=1
V(3)=1
V(4)=1

C
N1=1
N1=0
CALL FILL(1,NAME1)
N1=N1+1
READ(1,340) NIMOK, NAME, TEMP, XX0, YY0
FORMAT(I6,A6,3G15,7)
IF (NIMOK.EQ.0) GOTO 999

C
DO 360 K=1,32
READ(1,350) COUNTS(K), LM (F)
FORMAT(2G15,7)
CONTINUE

C
IF (NM.GT.11) 1K=KK+1
TAU=(TEMP-TC)/TC
V(10+K)=VALF
DO 370 K=1K1,1K2
M=N-KK+1
M=M+|K|-1+TRD
VF(NM)=COUNTS(K)
W(NM)=1/3*F(M)
XF(NM)=A(1)*FLOAT(KK)/10.
CONTINUE
IF (NM.(T-2) GOTO 360

C
C
425 CALL SRF(XF,YF,WF,ZF,HM,V,F,R,A,10,500)
C
DO 610 K=5,32
MG(K)=V(3)+V(4)*X(K)+V(5)*X(K)**2
1+V(6)*X(K)**3+V(7)*X(K)**4+V(8)*X(K)**5
WRITE(8,615) K,DG(K)
FORMAT(I3,F8,1)

C
WRITE(8,620) (V(I),E(I),I=1,10)
FORMAT(10(2G14,5/))
SSM=SSP/MG
WRITE(8,720) 1TF,1RF,1DF,HM,SSP,SSM,VARF,FRUUF
FORMAT(A14/4G15,7)
GOTO 111

C
999 STOP
END
C

```

PROGRAMM A15

```

C
DIMENSION COUNTS(32),ITF(32),X(32),ZF(32),
1A(32),Y(32),WF(32),V(2),I(2),A(2,2)
COMMON/VR01:/ITF,ITF,ISI,ITF,VAIF,IR01F

C
TYPE 100
FORMAT(' OLD FILENAME LEK FILERAMP ')
READ(8,110)NAME1,NAML2
FILERAMP(5,AB,1)

TYPE 115
FORMAT(' DISTANCE WAVLENGTH TC ')
READ(8,116) DIS,WLE,TC
FORMAT(3F)
P1=3.14159265
DU 170 K=1,32
ALPHA=ATAN(PI/100)
X(K)=4*PI/100*SIU(ALPHA/2)

C
TYPE 150
FORMAT(' FIT RANGE (X1 X2) ')
READ(8,160)I1,F2
FORMAT(2I)
TYPE 161
FORMAT(' LISTING OF WHICH SPECTRA? (ALL=-1) ')
READ(8,162) M1,M2,M3,M4,M5
FORMAT(5I)
TYPE 165
FORMAT(' NUMBER CH1 F=CHI XSI F=XSI
1 CH1=0 XSI=0 TAU')
I(1)=30
V(2)=20

C
CALL FILE(1,NAMK1)
READ(1,340)COUN1,NAME,TEMP,XX0,YY0
FORMAT(16,AB,3G15.7)
IF(NUMOR(1,0,0) GT0 900
DU 340 K=1,32
READ(1,350)COUNTS(K),EMI(K)
FORMAT(2G15.7)
CONTINUE

C
M1=K2-K1+1
DU 423 M=1,NF
M1E=K1+M-1
X1(M)=C(M1)
Y1(M)=COUNTS(M1)
M1(M)=1/Y1(M)
CONTINUE
CALL SRF(XF,YF,WF,ZF,NF,V,F,2,A,2,30)
Y(2)=ABS(V(2))

C
TAU=(TEMP/TC-1)
CHI0=V(1)*ABS(TAU)*1.3866
XS0=V(2)*RG(TAU)*.7054
I(1)=F(1)/V(1)*100
F(2)=F(2)/V(2)*100

C
IF(KKK.EQ.100) GOTO 700
CALL UP11(30,NAML2)
FK=100

700 N1=ITF(30,710) NUMOR,NAM1,2,TEMP,V(1),V(2),I(1),I(2)
710 FORMAT(16,AB,F10.3,4G15.7)

C
IF(M1.EQ.-1) GOTO 720
IF(NUMOR(1E,M1,AND,COUN1,ITF,M2
1,AND,NUMOR,M1,M3,AND,NUMOR,M1,M4
2,AND,NUMOR,M1,M5) GOTO 880

720 CONTINUE
WRITE(6,790)
FORMAT(1H)
WRITE(6,810) NUMOR,NAME2,TEMP
FORMAT(1H,5X,'SPECTRUM: ',I5,', ',I5,5X,'TEMPERATURE: ',
1F8.3,/)

C
DU 440 K=1,K2
Y=V(1)/(1+V(2)**2*X(K)**2)
YD=COUNTS(K)-Y
WRITE(6,435) K,X(K),COUNTS(K),Y,YD
FORMAT(5X,12,2X,12.3,3F12.2)
CONTINUE
WRITE(6,450) ITF,IPI,IMI,SSF,VANF,PR0UF,V(1),V(2)
FORMAT(314/3G15.7/2G15.7)
WRITE(8,890) NUMOR,V(1),F(1),V(2),F(2),CHI0,XS0,TAU,SSF
FORMAT(16,2X,4F9.2,F9.3,F9.2,2X,2G9.3)
GOTO 330

900 TEMP=1000
WRITE(30,910)NUMOR,NAMF2,TEMP,NU1L,NU1L,NU1L,NU1L
910 FORMAT(16,AB,F10.3,4G15.7)

C
STOP
END
C

```

PROGRAMM WUGP

```

C
DIMENSION NUM(40),CHI(40),CCHI(40),CHIR(40),CI(40),CXI(40),
XSI(10),XSI1(40),XSI2(10),X1(40),X11(40),
TEMP(40),TEM(40),TTR(40),
XPAR(4),XPAN(4)
TYPE 100
FORMAT(' TITLE NAME OUTPUT(0/8) LISTING(Y=1,N=0) ')
READ(8,110) NAME1,TW,IP
FORMAT(A5,2I)
IF(TW,LT,0) TW=8
C
200 CALL IPILL(1,NAME1)
N=1
210 READ(1,220) NUM(N),NAME,TEMP(N),CHIR(N),X6IR(N),CI(N),X1(N)
FORMAT(10,A,110,3,4G15,7)
220 IF (NUM(N).EQ.0) GOTO 500
N=N+1
GOTO 210
C
500 N=N+1
WRITE(8,510)
FORMAT(' TC ')
READ(8,520) TC
FORMAT(F)
IF(TC.EQ.0) GOTO 999
C
525 IF (TEMP(NF),LT,TC) GOTO 530
LEN(KK)=ALUG10((TEM(KK)-TC)/TC)
CHI(KK)=ALUG10(CHIR(KK))
XCI(KK)=ALUG10(XSIR(KK))
N=KK+1
GOTO 525
C
530 N=KK+1
WRITE(8,540) K
FORMAT(' RITRANGE M1-M2 (N= ',12,') ')
READ(8,541) M1,M2
FORMAT(2I)
C
M1=M2+M1+1
DO 550 H=1,MF
M1=M1+M-1
TTE(M)=TFH(MM)
CCHI(M)=CHI(MM)
XCSI(M)=XSI(MM)
CXI(M)=1
XSI(M)=1
550 CALL VC04C(TTE,CCHI,CC1,ME,CPAR,CRSTD,CCORR,IPRINT)
560 CALL VC04C(TTE,XCSI,XSE,NF,XPAR,XRSTD,XCORR,IPRINT)
C
CHIO=10**CPAR(1)
XSI0=10**XPAN(1)
CHIP=10**CPAR(1)*CPAR(3)-CHIO
CHIM=CHIO-10**CPAR(1)-CPAR(3)
XSJP=10**XPAN(1)+XPAN(3)-XSI0
XSIM=XSI0-10**XPAN(1)-XPAN(3)
IF(IP,NE,0) GOTO 700
C
700 IF(IP,NE,1) GOTO 860
WRITE(13,710)
FORMAT(' SPECT. TEMP CHI CHI-FIT
1 XCI XSI-FIT ')
K=K+2
DO 850 L=1,KK
CF=CPAR(1)+CPAR(2)*TEM(L)
XF=XPAN(1)+XPAN(2)*TFH(L)
WRITE(TW,820) NUM(L),TEM(L),CHI(L),CF,XSI(L),XF
820 FORMAT(16,5G10,4)
CONTINUE
850 WRITE(14,880) CPAR(2),CPAR(4),CHIO,CHIP,CHIM,CRSTD
880 FORMAT(6G10,4)
WRITE(14,885) XPAN(2),XPAR(4),XSI0,XSIP,XSIM,XRSTD
885 FORMAT(6G10,4)
GOTO 505
999 STOP
END

```

PROGRAMM MAXI

```

DIMENSION CHI(50),XSI(50),XF(50),ZF(50),NF(50),
1YF(50),H(50),LA(2),LHOLD(50),TFMP(50),
2H(200),A(8),I(8),C(8),L(8),G(8),H(8),J(8)
3,LTX(1),LTY(4),KTEA(L)
(CORRIG/VCOIB/1P
CORRHO U
EXTERNAL IFO7A
DATA ATX,IY,NTEX/4*,i,i,4*i,i,R**i /
DATA DTL,HLE,FIT/0.5%,6.60,3.14159265/
CC1=2*pi/LT/100./KLF
C
TYPE 100
FORMAT(/,1,L,FILENAME,NEW FILENAME FACT 6/8 i)
100 READ (R,100)NAME1,NAME2,FACT,1PF
110 FORMAT(A5,1X,A5,F,1)
IF (1PF.LT.6) 1PI=B
1PI=0
CALL IFIL4(1,NAME1)
CALL OFIL4(30,NAME2)
C
LL=0
LL=LL+1
HADD(1,125) MUPOP(LL),NAME,TFMP(LL),CHI(LL),XSI(LL),F1,E2
125 FURMAT(I6,AU,F10.3,4G15.7)
IF(NHMOD(LL),HF=0) GOTO 120
LL=LL-1
C
TYPE 150,LL
FORMAT(/,1,BADINS RANGE FIT RANGF (SP1 SPH<=I,12,i)
150 ILVAK HLT=1)
READ(8,160) IR1,IR2,K1,I2,NVAR,1PLO
FURMAT(6I) C 795 CONTINUL
NR=K2-K1+1 CCC WRITF(30,511)IR,XD,EM
IF(NVAR.FU.O) NVAR=3 CCC511 FURMAT(17,2G15.7)
IF(K1.FU.O) GUTU 999 500 WRITE(30,510) IR,K1,K2,NVAR,XD,EM
DO 800 IP=IK1,IK2 510 FURMAT(4I3,2G15.7)
IK=IKR WRITE(30,520) C(I),B(I),C(I),I=1,8)
C CALL DATF(Dn) 520 FURMAT(8,3G15.7/I)
WRITF(IP,180) DA(1),LA(2) C 600 WRITF(IP,610) NAME1,NAME2,IR,K1,K2,NVAR,YD,XD,FD,FM
180 FURMAT(/,HAX1,2,2A5/) C 610 FURMAT(2A6,5I3,3F12,3/)
M=0 C 620 WKITF(IP,620) (H(I),I=1,8)
DO 420 E=K1,K2 C 620 FURMAT(4G12,3/4G12,3)
M=M+1 IF(IPP.EQ.8) GOTO 650
CY=(XSI(K)/10000.*FLDAT(IR))*2 SU=0
VF(M)=CHI(K)/(1+CY) DU 650 M=1,NR
VF(N)=HI(K)*(1+O.01378*CY)*.0215/(1+CY) IF(1PLO.NE.O) XF(K)=XF(I)+ACT
CCC CY=(XSI(K)*C(1+FLDAT(IR))*2 SU=SU+WF(YF(M)-ZF(M))*2
CCC VF(M)=CHI(K)/(1+CY) DJFF=VF(M)-VF(M)
WY(M)=1/YI(H) WRITE(IP,630) NF(M),XF(M),YF(M),ZF(M),DJFF,SU
420 XF(M)=TLNH(K) 630 FURMAT(IR,F10.3,3F9.2,G12.3)
NF(N)=NUHP(K) 650 CONTINUE
C
DL 424 K=1,8 C 800 CONTINUE
A(K)=0 C 800 GUTO 140
H(F)=0 C 999 WRITE(10,510)HILL,K1,K2,NVAR,XD,FM
C(K)=0 STOP
424 H(K)=0 ENH
C
CALL VCOIA(XF,YF,HF,ZF,NR,A,B,C,G,H,L,NVAR)
XD=C(1)*(A(1)+A(2))-C(2))/Z/C(1)
IF(ABS(XD-FACT).GT.1) XU=1 ACT+.23
427 XD=3
STEP=.01*IR
450 FD=-PEO7A(NVAR,A,B,C,XD)
CALL VOOJA(RD,XD,FD,1000,1F-6,1E-7,STEP)
IF(KD.EQ.1) GUTO 450
FD=PEO7A(JIVAP,A,B,C,XD)
EH=SQRTH((NVAR+1)/(IR-NVAR-1)*FI)
C
IF(1PLO.FU.O) GUTO 795
ENCODF(40,70,NTX(1))IR,K,K2,I.VAR,KU,XD,NAME1
710 FURMAT(X,5I3,F10.3,5X,A5)
DO 711 K=1,NR
711 XF(K)=XF(K)-FACT
XD=XD-FACT
C
CALL PLTGT(XF,YF,YF,1,NR,1,1,NTX,NTY,NTEX,1,0)
CALL PLTGT(XF,ZF,ZF,-1,NR,-1,1,NTX,NTY,NTEX,0,0)
CALL PLTGT(XD,FD,FD,-1,1,-1,1,NTX,NTY,NTEX,1,1)
ACCEPT 790,LW
790 FURMAT(1)
IF(LW.NE.1) GUTO 800
XD=XD+FACT

```

PROGRAMM ETA

[illegible]

PROGRAMM ALS6

```

C
EXTERNAL FUNC
PIAL DA(2)
COMMON/FUNK/QLL,PI,THE,ZK1,ZM2H,CHI,XS1,CINL,TEMP
COMMON/UAOSKX/TPK

C
DATA IPR/8/
DATA PI,WLE,DIS,ZM2H,CINE
1/3,141592654,6,65,10,5,0,4825847,330/
DATA CHIO,XSIO,GA,ZNY,TC/,165,1.77,1.378,0,701,679,23/

C
CALL DATE(DA)
TYPE 50,(A(1),I4(2))
FORMAT(' ALS3 ',2A5)

50
C
100 TYPE 110
110 FURMAT(' TEMPERATUR RADIUS ') FUNCTION FUNC(OM)
ACCEPT 120,TEMP,K EXTERNAL ARC
FURMAT(G,3) COMMON/FUNK/QLL,PI,THE,ZK1,ZM2H,CHI,XS1,CINL,TEMP
120 IF (TEMP.FU.0) GOTO 999 COMMON/CHI/UMH
TALL=(TEMP-TC)/TC INH=0H
CHI=CHIO/TAU**GA A=ZKI*.91001
XS1=XSIO/TAU**ZNY B=ZKI*1.08999
Z1=2*PI/WLE CALL QAL5A(VALA,ABC,A,ZKI,11-20,1E-3,1,EPR,IFL)
ANS=0 CALL QAL5A(VALB,ABC,ZKT,B,11-20,1E-3,1,EPR,IFL)
Z1=2*PI/WLE FUNC=VALA+VALB
THI=ATAN(K/PI/100) RETURN
G1L=4*PI/VAL*STH(THI/2) FAL
CHAX=CHIF*UEL**2.5
ZK1=2K1**2/ZH2H
FAK=100/SORT(FLUAT(K))
ZHIN=-5*ZH
ZMAX=-FAK*CHAX
FLKR=IF-2
GOTO 190
170 ZHIN=-FAK*CHAX
ZMAX=0.
FLKR=IF-3
GOTO 190
175 ZHIN=0.
ZMAX=FAK*CHAX
FLKR=IF-3
GOTO 190
180 ZHIN=FAK*CHAX
ZMAX=.9*Z1.
FLKR=IF-2
IF (ZMAX.GT.ZV) ZMAX=.9*ZH
IF (ZHIN.GT.ZMAX) ZMIN=ZMAX
200 CALL QAL5A(ANS,FUNC,ZPK,ZMAX,1E-20,BERR,1,IPR,IFL)
IF (IFL.GT.3) GOTO 910
G1L=CHI/(1+XS)**2*QLL**2)
ANS=ANS+ANS
TYPE 705,ANS,EPR,IFL
FURMAT(15X,2G,13)
IF (ZMAX.LT.0) GOTO 170
IF (ZMAX.FU.0) GOTO 175
IF (ZHIN.FU.0) GOTO 180
710 CHIR=GEL/ANS
S=(XS**U1)
TYPE 770,I,S,C,GEL,ANS,C,OMH
720 FURMAT(14,4G13.5)
730 CONTINUE
GOTO 100
910 TYPE 920,IFL,IF2,K
920 FURMAT(' IFL ',3I)
GOTO 700
999 FAL
C
C
C
FUNCTION ARC(ZK1)
COMMON/FUNK/QLL,PI,THE,ZK1,ZM2H,CHI,XS1,CINL,TEMP
COMMON/CHI/UMH
ZP=SQRT(ZK1**2-7H2H*UMH)
U2=ZK1**2*Z1**2-2*ZK1*U1*(U1/THI)
O1=SQRT(O2)
Y2=O2*XS1**2
Y1=SQRT(Y2)
G=CHI/(1+Y2)
IF (1/Y1.GL.1.1671) RP=XP*(-1.957/Y1)+0.4314*SQRT(1/Y1)
IF (1/Y1.IT.1.1671) RP=.567946174+.2718*(1.1671-1/Y1)**1
CDE=(1+U1**2-5*RP)
S1=C*Y1.4R2**C1/2
F=XP*(-.5*UMH**2/SLGM**2)/SIGN(SORT(2*PI))
J1=(TEMP.FU.0) TEMI=670
B1=1).6047/TH*P*OMH
P=1/(1-L1/2+B1**2/6)
FIR=1/.09/2*Y1
ALC=ZPK/Z11*H*G*F*(F*H-J1H**2*ABS(ZK1-ZK1))
P1=TUNN
END

```

An dieser Stelle möchte ich allen danken, deren Hilfe die Durchführung dieser Arbeit möglich gemacht hat.

Herr Prof. Dr. K. Stierstadt gab die Anregung zu dieser Arbeit. Ihm möchte ich für seine verständnisvolle Unterstützung, die zahlreichen Ideen, die in die Arbeit einfließen, die vielen Gespräche und sein ständiges Interesse danken.

Besonderer Dank gebührt auch Herrn Dr. G. Göltz und Herrn W. v. Hörsten für die Hilfe und Zusammenarbeit zu Tages- und Nachtzeit während der Meßperioden am Neutronen-Spektrometer.

Des weiteren bin ich den Herren Dr. B. Dorner, Dr. R. Feld, A. Gregory, Dr. K. Haverkamp, Dr. K. Ibel, E. Koglin, Prof. Dr. G. Kostorz, Dr. J. Schelten, Dr. H. Scheuer und Dr. F. Söffge für wertvolle Diskussionen zu Dank verpflichtet.

Den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe, den Damen und Herren der Geschäftsführung der Sektion Physik, sowie den Herren der Werkstatt gilt mein Dank für gute Zusammenarbeit.

Dem Institut Max von Laue - Paul Langevin danke ich für die großzügige finanzielle Unterstützung und die Überlassung von Meßzeit am Reaktor. Herrn Prof. Dr. R. Mößbauer danke ich für die Aufnahme am Institut, Herrn Prof. Dr. T. Springer für sein wohlwollendes Interesse am Fortgang der Arbeit.

Dem Bundesministerium für Forschung und Technologie danke ich für die Bereitstellung von Geldmitteln.

Nicht zuletzt ein Dankeschön an Edith für ihre Geduld und Hilfsbereitschaft.

Lebenslauf

Angaben zur Person:

Name: Rainer Anders
Geburtsdatum: 29. Dezember 1949 in Bamberg
Eltern: Walter Anders, Bundeswehrangehöriger
und Elisabeth Anders, geb. Hoffmann
Familienstand: verheiratet mit
Edith Anders, geb. Orawa, Studienrätin
Kinder: Simon (geb. 22.12.76) und Jens (geb. 25.8.78)

Schulbildung:

1956 - 1960 Volksschule in Bamberg
und München
1960 - 1969 Gisela Gymnasium in München
Reifeprüfung am 28.6.1969

Studium:

1969 - 1975 Physik an der Universität
München

Diplomarbeit unter Leitung von Herrn
Prof. Dr. K. Stierstadt über "Komplexe
Suszeptibilität von YIG in der Umgebung
der Curie-Temperatur".

Diplomhauptprüfung 11.7.1975

Beruf:

1975 - 1976 wissenschaftlicher Ange-
stellter und Lehrauftrag für
Physik an der Universität
München

1976 - 1980 wissenschaftlicher Mitarbeiter
am multinationalen Forschungs-
institut (Höchstflußreaktor)
Laue - Langevin in Grenoble

1980 - 1981 wissenschaftlicher Angestellter
an der Universität München
im Rahmen des Forschungsbe-
reichs "Nukleare Festkörper-
physik" des Bundesministeriums
für Forschung und Technologie

Die vorgelegte Dissertation wurde unter
Leitung von Herrn Prof. Dr. K. Stierstadt
in der Zeit von 1976 bis 1980 angefertigt.

